Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U102771

Державний реєстраційний номер: 0119U103480

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-05-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Мультимасштабне моделювання взаємодії дислокацій, дислокаційних петель та границь зерен з кластерами дефектів в опромінюваних нейтронами сплавах на основі цирконію

Початок етапу: 08.2019

Закінчення етапу: 03.2020

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут прикладної фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05399225

Місцезнаходження: вул. Петропавлівська, 58, м. Суми, Сумський р-н., Сумська обл., 40000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380542222794, 380542223760

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інженерна ядерно-енергетична компанія

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження: First Ring Road, 328, Ченгду, 610041, Китайська Народна Республіка (КНР)

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 862885903561

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 09 - договір із закордонним замовником

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7716 - кошти замовників іноземних держав

Фактичний обсяг фінансування (тис. дол.): 47

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Мультимасштабне моделювання взаємодії дислокацій, дислокаційних петель та границь зерен з кластерами дефектів в опромінюваних нейтронами сплавах на основі цирконію

Назва роботи англійською:

Multiscale modeling an interaction of dislocations, dislocation loops, and grain boundaries with defect clusters in neutron irradiated zirconium-based alloys

Реферат українською:

Проведено атомістичне моделювання з перших принципів дефектоутворення у сплавах на основі цирконію з домішками Fe, Cu, Nb та Sn. Досліджено властивості вторинних фаз та кластерів дефектів. Запропоновано новий потенціал міжатомної взаємодії для сплавів Zr-Fe та Zr-Cu для моделювання методами молекулярної динаміки. Він був випробуваний на етапі підготовки (відпалу) зразків, механічного випробування підготовлених зразків, а також у каскадах при нейтронному опроміненні. Розроблено теоретичну модель моделювання кластерної динаміки сплавів Zr-Nb-Sn при різних умовах опромінення з різним вмістом легуючих елементів, розміром зерен, розміром преципітатів. Розроблено модель для опису росту дислокаційних петель у рамках теорії швидкостей реакцій, що узагальнена включенням локального опису зростання петель, спричиненого впливом меж зерен та зростання преципітатів. Проаналізовано залежність розміру петлі, деформації та зміцнення при різних температурах, розмірах зерна та преципітатів, вмісту легуючих елементів, локального розподілу петель всередині зерна, а також ефективності кластеризації в сплавах Zr-Nb-Sn в умовах опромінення в реакторах. Розроблено комбінований підхід, заснований на теорії фазового поля, теорії швидкостей реакцій та теорії пружності для вивчення перетворень мікроструктури та розвитку дефектної структури в сплавах Zr-Sn. Обговорюються властивості стійкості вторинної фази A15 при нейтронному опроміненні, локальна перебудова точкових дефектів під час нейтронного опромінення, формування розвиненої дислокаційної структури та зміна механічних властивостей опромінених зразків сплавів Zr-Sn.

Реферат англійською:

An atomistic modeling from the first principles of defect formation in Zirconium based alloys with Fe, Cu, Nb and Sn impurities is performed. The properties of secondary phases and defect clusters are investigated. A new interatomic interaction potential for Zr-Fe and Zr-Cu alloys for molecular dynamics modeling is proposed. It was tested at the stage of the sample preparation (annealing), mechanical testing of the prepared samples, as well as in the cascades under neutron irradiation. A theoretical model for the cluster dynamics modeling of Zr-Nb-Sn alloys under different irradiation conditions with different content of alloying elements, grain size, precipitates size is developed. A model for describe the dislocation loops growth is developed within the framework of reaction rate theory, which is generalized by the inclusion of a local description of the loops growth caused by the influence of grain boundaries and precipitates growth. A dependence of loop size, deformation and hardening are analyzed at different temperatures, grain size, precipitates size, content of alloying elements, local distribution of loops inside the grain, as well as clustering efficiency in Zr-Nb-Sn alloys under irradiation conditions in the reactors. A combined approach based on phase field theory, reaction rate theory, and elasticity theory was developed in order to study microstructure transformations and the evolution of defect structure in Zr-Sn alloys. A stability properties of the secondary A15 phase under neutron irradiation are discussed, as well as the local rearrangement of point defects during neutron irradiation, formation of the developed dislocation structure and mechanical properties change of irradiated Zr-Sn alloy samples.

Індекс УДК: 548.571;548.4, 539.2, 669.017:548.4

Коди тематичних рубрик:29.19.11, 29.29.43, 53.49.05.05

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Харченко Дмитро Олегович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Теоретичні положення та алгоритми числового моделювання.

Назва НТП англійською: Theoretical positions and numerical modeling algorithms.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19 Дослідження і експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблені методики та алгоритми для числового моделювання в рамках багаторівневого підходу (атомістичне моделювання за першими принципами, моделювання молекулярної динаміки, моделювання за допомогою теорії фазового поля, теорії швидкостей реакцій, теорії пружності та термодинамічних підходів) дозволяють дослідити перетворення мікроструктури та розвиток дефектної структури, встановити властивості вторинних фаз та кластерів дефектів, еволюції дислокаційної мікроструктури, радіаційного росту та зміни механічних властивостей цирконієвих сплавів при нейтронному опроміненні за реакторних умов з урахуванням взаємодії кластерів дефектів з дислокаційною сіткою, петлями дислокацій та межами зерен, нуклеації дислокаційних петель.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 08.2019

Закінчення етапу: 03.2020

Споживачі продукції: ІПФ НАН України, ННЦ ХФТІ НАН України, ІЯД НАН України

Перспективні ринки: Україна, Європа

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи: Права не надаються

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Сторіжко Володимир Юхимович
д. ф.-м. н., 01.04.16

Перелік осіб-виконавців

Баштова Анна Іванівна
(к. ф.-м. н.)

Кохан Сергій Васильович
(к. ф.-м. н.)

Купрієнко Віктор Вікторович

Лисенко Ірина Олегівна
(к. ф.-м. н.)

Лисенко Олег Борисович
(к. ф.-м. н.)

Овчаренко Юрій Михайлович
(к. ф.-м. н.)

Харченко Василь Олегович
(д. ф.-м. н., 01.04.02)

Харченко Дмитро Олегович
(д. ф.-м. н., 01.04.02)

Щокотова Ольга Михайлівна
(к. ф.-м. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів — Ворошило О.І.

Телефон — +38 (054) 222-46-08

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

