Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U004981

Державний реєстраційний номер: 0121U108687

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-12-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Процеси переносу у середовищах із структурним та енергетичним безладом: теоретичні моделі, чисельне моделювання та аналіз випадкових траєкторій. МД моделювання впливу композиційного упорядкування на мартенситні перетворення в бінарному сплаві NiAl

Початок етапу: 01.2023

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітного документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 14312223

Місцезнаходження: вул. Академічна, буд. 1, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61108, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380573353530, 380573351688, 380573356425

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442350981

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 4840.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Теорія фазових перетворень, кінетичних і дифузійних явищ в конденсованих середовищах

Назва роботи англійською:

A theory of phase transformations, kinetic and diffusion phenomena in condensed media

Реферат українською:

Було виявлено, що дробовий броунівський рух, гаусівський немарківський самоподібний процес зі стаціонарними довгокорельованими приростами, викликає аномальну дифузійну поведінку у великій різноманітності фізичних систем. Кореляційні та дифузійні властивості цього випадкового руху повністю характеризуються його індексом самоподібності або показником Херста. Однак нещодавні експерименти з відстеження окремих частинок у біологічних клітинах виявили дуже складні явища аномальної дифузії, які не можна віднести до класу самоподібних випадкових процесів. Вивчається процес, який зберігає властивості дробового броунівського руху на рівні однієї траєкторії; однак індекс Херста випадково змінюється від траєкторії до траєкторії. Надається загальна математична структура для аналітичного, числового та статистичного аналізу дробового броунівського руху з випадковим показником Херста. Явні формули для функції щільності ймовірності, середньоквадратичного зміщення та функції автоковаріації приростів представлені для трьох загальних розподілів експоненти Херста, а саме двоточкового, рівномірного та бета-розподілу. Проведено молекулярно-динамічне моделювання мартенситних перетворень в упорядкованих сплавах Ni5Al3 та Ni7Al5 в залежності від дози радіаційних пошкоджень. Рівень композиційного невпорядкування пов'язаний із радіаційною дозою коефіцієнтом заміщення, тобто відносною часткою перестановок атомів у вузлах кристалу. Композиційне перемішування разом із генерацією пар Френкеля є важливими характеристиками радіаційних пошкоджень упорядкованих сплавів. Показано, що збільшення рівня невпорядкування сприяє високотемпературній аустенітній ОЦК фазі. Температура мартенситного переходу зменшується на величину до 300 °C. Дослідження сфокусовано на локальних композиційних перестановках, що спостерігаються при електронному опроміненні. Очікується, що опромінення високоенергетичними нейтронами може призводити до ще більшого ефекту.

Реферат англійською:

Fractional Brownian motion, a Gaussian non-Markov self-similar process with stationary long-correlated increments, has been found to induce anomalous diffusive behavior in a wide variety of physical systems. The correlation and diffusion properties of this random motion are fully characterized by its self-similarity index or Hurst exponent. However, recent experiments on the tracking of individual particles in biological cells have revealed very complex phenomena of anomalous diffusion, which cannot be attributed to the class of self-similar random processes. The process that preserves the properties of fractional Brownian motion at the level of one trajectory is studied; however, the Hurst index varies randomly from trajectory to trajectory. A general mathematical framework for the analytical, numerical, and statistical analysis of fractional Brownian motion with a random Hurst exponent is provided. Explicit formulas for the probability density function, rms increment, and increment autocovariance function are presented for three general Hurst exponent distributions, namely the two-point, uniform, and beta distributions. Molecular dynamics simulation of martensitic transformations in ordered alloys Ni5Al3 and Ni7Al5 depending on the dose of radiation damage was performed. The level of compositional disorder is related to the radiation dose by the substitution coefficient, i.e., the relative fraction of permutations of atoms at the crystal lattice sites. Compositional mixing together with the generation of Frenkel pairs are important characteristics of radiation damage in ordered alloys. It is shown that an increase in the level of disorder favors the high-temperature austenitic bcc phase. The temperature decrease of the martensitic transition reaches 300 °C. The research is focused on local compositional rearrangements observed during electron irradiation. It is expected

that high-energy neutron irradiation may lead to an even greater effect.

Індекс УДК: 531.4, 531.4, [536.425+538.93+537.874]:538.911

Коди тематичних рубрик: 30.15.41

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Бакай Олександр Спепанович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

IX. Бібліографічний опис

1. R. Metzler, A.V. Chechkin, Non-Gaussian stochastic transport. In: B.J. West and S. Bianco (Eds), Paolo Grigolini and 50 Years of Statistical Physics. Cambridge Scholars Publishing, 2023, Chapter 5, pp. 71-93.

2. Abyzov A.S., Fokin V.M., Yuritsyn N.S., Nascimento M.L.F., Schmelzer J.W.P., Zanotto E.D., Crystal nucleation in a glass during relaxation well below Tg. J. Chem. Phys. 158 (2023) 064501. https://doi.org/10.1063/5.0137130.

3. Schmelzer J.W.P., Tropin T.V., Abyzov A.S., Kinetics of precipitation processes at nonzero input fluxes of segregating particles. Entropy 25 (2023) 329; https://doi.org/10.3390/e25020329.

4. Yu.M. Poluektov, A.A. Soroka. Phonon and Optical-roton Branches of Excitations of the Bose System. Journal of Low Temperature Physics, 210 (2023) 68-92. https://doi.org/10.1007/s10909-022-02885-8.

5. Yu.M. Poluektov. Accounting for the long-range forces in the model of hard sphere. Metallophysics and Advanced Technologies, 45 (2023) 423-430. https://doi.org/10.15407/mfint.45.03.0423.

6. W. Wang, M. Balcerek, K. Burnecki, A.V. Chechkin, S. Janusonis, Ja. Ślęzak, T. Vojta, A. Wyłomanska, and R. Metzler, Memory-multi-fractional Brownian motion with continuous correlations. Physical Review Research (Letter) 5, L032025 (2023). https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.5.L032025.

7. Q. Wei, W. Wang, H. Zhou, R. Metzler, and A.Chechkin, Time-fractional Caputo derivative versus other integrodifferential operators in generalized Fokker-Planck and generalized Langevin equations. Physical Review E 108, 024125 (2023). https://doi.org/10.1103/PhysRevE.108.024125.

8. Costantino Di Bello, A.V. Chechkin, A. K. Hartmann, Zbigniew Palmowski and Ralf Metzler, Time-dependent probability density function for partial resetting dynamics. New J. Phys. 25 (2023) 082002 (Fast Track Communication). https://doi.org/10.1088/1367- 2630/aced1d.

9. T. J. Doerries, R. Metzler and A. V. Chechkin, Emergent anomalous transport and nonGaussianity in a simple mobile–immobile model: the role of advection. New J. Phys. 25 (2023) 063009. https://doi.org/10.1088/1367-2630/acd950.

10. A. L. Stella, A. Chechkin, G. Teza, Universal singularities of anomalous diffusion in the Richardson class. Physical Review E107 (2023) 054118. https://doi.org/10.1103/PhysRevE.107.054118.

11. A. L. Stella, A. Chechkin, G. Teza, Anomalous Dynamical Scaling Determines Universal Critical Singularities. Physical Review Letters 130 (2023) 207104. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.130.207104.

12. E. Lemaitre, I. M. Sokolov, R. Metzler, and A. V. Chechkin, Non-Gaussian displacement distributions in models of heterogeneous active particle dynamics New J. Phys. 25 (2023) 013010. https://doi.org/10.1088/1367-2630/acb005.

13. Yu.M. Poluektov, A.A. Soroka. To the theory of phase transition of a binary solution into an inhomogeneous phase. arXiv:2303.06405 (прийнята до друку в журналі Phase Transition). https://doi.org/10.48550/arXiv.2303.06405.

14. Yu.M. Poluektov. Phase transition in a phonon gas with pair correlation. arXiv:2211.08817. https://doi.org/10.48550/arXiv.2211.08817.

15. Yu.M. Poluektov. Does a massless Goldstone boson exist? arXiv:2304.02024. https://doi.org/10.48550/arXiv.2304.02024.

16. Yu.M. Poluektov, A.A. Soroka. Quantum distribution functions in systems with an arbitrary number of particles. arXiv:2311.03003. https://doi.org/10.48550/arXiv.2311.03003.

17. N. V. Alekseechkin, On the thermodynamic theory of curvature-dependent surface tension, відправлено до друку, Surfaces and Interfaces; arXiv:2309.14110. https://doi.org/10.48550/arXiv.2309.14110.

18. A.A. Turkin, S. Sabooni1, L.Q. Lu, R.J. Westerwaal, E. Zoestbergen, Y.T. Pei, Modeling of phase transformations in Zn-Mg coatings during annealing, submitted to Journal of Alloys and Compounds, 2023.

19. Macena G. S., Abyzov A.S., Fokin V.M., Nascimento M.L.F., Zanotto E.D., Ferreira E.B., Diffusion zone evolution around growing crystals in combeite glass. J. American Ceramic Society (accepted for publication).

20. Kosinov A.V., Pudov A.O., Sokolov S.A., Rybka A.V., Kutny V.E., Davydov L.N., Abyzov A.S. Simulation of thin-film detectors of ionizing radiation and thermal neutrons based on CdTe. Journal of Applied Physics (accepted for publication).

21. A. I. Bezuglyj, I. V. Mironenko, and V. A. Shklovskij, Effective cross-plane thermal conductivity of metal-dielectric multilayers at low temperatures, відправлено до друку, Фізика низьких температур, 2023.

22. A. I. Bezuglyj, L. N. Davydov, Phonon heat removal from heated metal nanoparticles and dynamics of nanoparticle cooling at low temperatures, підготовлено для журналу New Journal of Physics, 2023.

23. Kotlyar V.V. Four bottom quark production in proton-proton collisions at the LHC energies. XXX Щорічна наукова конференція Інституту Ядерних Досліджень НАН України, Анотації доповідей (25-29 вересня 2023 р., Київ), 2023. http://www.kinr.kiev.ua/Annual_Conferences/KINR2023/book%20of%20abstracts_2023.pdf.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи — Шульга Микола Федорович
д. ф.-м. н., 01.04.02

Перелік осіб-виконавців

Абизов Олександр Сергійович
(д. ф.-м. н.)

Алєксєєчкін Микола Васильович
(к. ф.-м. н., старший науковий співробітник)

Бакай Олександр Степанович
(д. ф.-м. н., професор, академік НАН України, 01.04.02)

Безуглий Олексій Іванович
(к. ф.-м. н.)

Борисенко Олександр Олексійович
(к. ф.-м. н.)

Давидов Леонід Миколайович
(к. ф.-м. н.)

Котляр Володимир Вікторович
(н.с)

Лаврова Галина Миколаївна
(к. ф.-м. н.)

Лазарєв Микола Павлович
(к. ф.-м. н., с.н.с.)

Мчедлов-Петросян Петро Отарович
(к. ф.-м. н.)

Полуектов Юрій Матвійович
(д. ф.-м. н., с.н.с., 01.04.02)

Сорока Олексій Олександрович
(к. ф.-м. н.)

Степановський Юрій Петрович
(к. ф.-м. н., с.н.с., 01.04.02)

Туркін Анатолій Аркадійович
(д. ф.-м. н., пров.н.с., 01.04.02)

Чечкін Олексій Вікторович
(д. ф.-м. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів — Борисенко О. О.

Телефон — +38 (057) 335-62-03

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Тетяна Анатоліївна