Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0220U102919

Державний реєстраційний номер: 0116U007066

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 24-06-2020

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Кінетика зародження у розчинах з урахуванням оборотних елементарних процесів на міжфазній границі. Зародження і еволюція фракталоподібних наночастинок у газовій фазі

Початок етапу: 01.2019

Закінчення етапу: 12.2019

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, 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

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, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

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.): 1920

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Кінетика фазових перетворень в конденсованих системах. Розвиток теорії ядерних взаємодій при високих енергіях.

Назва роботи англійською:

Kinetics of phase transformations in condensed systems. The development of theory of nucleus interactions at high energies.

Реферат українською:

Під час зародження та росту кластеру виділення із пересиченого розчину, дифузійний потік між кластером та розчином змінює концентрацію домішки поблизу міжфазної границі порівняно із середнім об'ємним значенням. Це яквище впливає на швидкості приєднання та від'єднання атомів домішки на границі і, нарешті, змінює всю кінетику нуклеації та росту. Для ілюстрації цього підходу, у випадку гомогенної нуклеації, розраховано повну (з урахуванням внеску гетерофазних флуктуацій) межу розчинності та швидкість нуклеації як функції двох параметрів моделі – питомої міжфазної енергії та зворотного другого числа Дамкьолера, і порівняно з результатами класичної теорії. Зроблено висновок, що невідповідність із результатами класичної теорії нуклеації є великою в дифузійно-обмеженому режимі, коли швидкість об'ємної дифузії мала порівняно зі швидкістю поверхневих реакцій, а у протилежному поверхнево-обмеженому випадку невідповідність зникає. Представлено кінетику утворення фрактальних агрегатів діоксиду кремнію при спалюванні стехіометричної суміші метану і повітря із домішкою гексаметилдісілоксану. Окислення гексаметилдісілоксану протікає дуже швидко з утворенням молекул діоксиду кремнію та компактних кластерів діоксиду кремнію на відстані декількох міліметрів від пальника. При досить високій концентрації гексаметилдісілоксану випадкові зіткнення наночастинок призводять до агломератів з фракталоподібною структурою. Початок утворення фракталоподібних агрегатів контролюється кінетикою процессів зіткнень та злиття. Сформулювано модель, яка описує еволюцію розподілу за розмірами частинок фракталоподібного діоксиду кремнію, що включає генерацію, конвекцію, спікання та коагуляцію Смолуховського. Результати моделювання порівнюються з експериментальними даними.

Реферат англійською:

During the processes of nucleation and growth of a precipitate cluster from a supersaturated solution, the diffusion flux between the cluster and the solution changes the solute concentration near the cluster-solution interface from its average bulk value. This feature affects the rates of attachment and detachment of solute atoms at the interface, and, therefore, the entire nucleation-growth kinetics is altered. To illustrate the results of this approach, for the case of homogeneous nucleation, we calculate the total (including the contribution from heterophase fluctuations) solubility and the nucleation rate as functions of two parameters of the model – the reduced interface energy and the inverse second Damköhler number, and we compare these results to the classical ones. One can conclude that discrepancies with classical nucleation theory are great in the diffusion-limited regime, when the rate of bulk diffusion is small compared to the rate of interface reactions, while in the opposite interface-limited case they vanish. The kinetics of the formation of fractal aggregates of silicon dioxide during the combustion of a stoichiometric mixture of methane and air with an admixture of hexamethyldisiloxane is presented. The oxidation of hexamethyldisiloxane proceeds very rapidly with the formation of silicon dioxide molecules and compact clusters of silicon dioxide at a distance of a few millimeters from the burner. At a sufficiently high concentration of hexamethyldisiloxane, random collisions of nanoparticles lead to agglomerates with a fractal-like structure. The onset of fractal-like aggregates is controlled by the kinetics of collision and fusion processes. A model that describes the evolution of the particle size distribution of fractal-like silicon dioxide is formulated, which includes generation, convection, sintering and Smolukhovsky's coagulation. The simulation

results are compared with experimental data.

Індекс УДК: 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)

Назва НТП українською: Швидкості приєднання та від'єднання атомів домішки на міжфазній поверхні з урахуванням оборотних поверхневих реакцій

Назва НТП англійською: The rates of attachment and detachment of solute atoms at the interface taking into account reversible interface reactions

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: К 73.10.0 Дослідження та розробки в галузі природничих та технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: У рамках теорії Гіббса-Томсона з урахуванням дифузійного збурення профілю концентрації домішки в розчині навколо кластеру отримано швидкості приєднання та від'єднання атомів домішки на міжфазній поверхні. Ці вирази застосовано для розрахунку межі розчинності домішки та швидкості зародження кластерів у формалізмі кластерної динаміки та проведено порівняння з результатами класичної (без урахування дифузійного збурення) теорії зародження.

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:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. A.V. Shebeko, Intrinsic Density Matrices and Related Quantities of Finite Quantum Systems, Chapter 2 in the book: Understanding Density Matrices , Ed. N.V. Danielsen, 2019 Nova Science Publishers Inc., New York.

2. А.А.Туркин, Теория фазовых превращений в неупорядоченных сплавах замещения под облучением, в кн. Проблемы теоретической физики. Научные труды. Выпуск 3, Серия «Проблемы теоретической и математической физики. Научные труды» Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина, 2019, стр. 58-199.

3. O. Bakai, M. Bratchenko, Stochastic dynamics of a nonlinear oscillator driven by periodic force with slowly varying frequency, Low Temperature Physics, надіслано до друку, 2019

4. O. Bakai, The van der Waals idea of pseudo associations and the critical compressibility factor, Cond. Mat. Phys, прийнято до друку, 2019

5. N.V. Alekseechkin, Thermodynamics and kinetics of nucleation in binary solutions, Chemical Physics, 517 (2019) 138-154

6. A.Borisenko. Theoretical evidence for stationary size distribution of oxide nanoparticles in dispersion strengthened steel under cascade producing irradiation. Problems of Atomic Science and Technology. 2019 №5(123) p. 3-10.

7. J.-Ch. Sublet, I. P. Bondarenko, G. Bonny, J. L. Conlin, M. R. Gilbert, L. R. Greenwood, P. J. Griffin, P. Helgesson, Y. Iwamoto, V. A. Khryachkov, T. A. Khromyleva, A. Yu. Konobeyev, N. Lazarev, L. Luneville, F. Mota, C. J. Ortiz, D. Rochman, S. P. Simakov, D. Simeone, H. Sjostrand, D. Terentyev, R. Vila, Neutron-induced damage simulations: Beyond defect production cross-section, displacement per atom and iron-based metrics, Eur. Phys. J. Plus, 134 (1.7) (2019) 350. DOI: 10.1140/epjp/i2019-1

8. T. Horbatiuk, V. Kotlyar, M. Maslov, A. Safronov, Production of $c\bar{c}$ and $b\bar{b}$ Quark Pairs in pp Collisions at Energies of Experiments at the Large Hadron Collider, East European Journal of Physics. No 1 (2019) 40-45.

9. A.V. Shebeko, From Quantum Field Theory to the Contemporary Quantum Mechanics, Talk at World Conference of Quantum Mechanics and Nuclear Engineering (Paris-19, September 2019), accepted for publication in the journal Advances in Theoretical and Computational Physics.

10. Trifce Sandev, Zivorad Tomovski, Johan L. A. Dubbeldam and Aleksei Chechkin, Generalized diffusion-wave equation with memory kernel. J. Phys. A: Math. Theor. 52 (2019) 015201 (22pp).

11. Bartłomiej Dybiec, Karol Capała, Aleksei V Chechkin and Ralf Metzler, Conservative random walks in confining potentials. J. Phys. A: Math. Theor. 52 (2019) 015001 (25pp).

12. Vittoria Sposini, Aleksei Chechkin and Ralf Metzler, First passage statistics for diffusing diffusivity. J. Phys. A: Math. Theor. 52 (2019) 04LT01 (11pp) (Letter).

13. O.Yu. Sliusarenko, S. Vitali, V. Sposini, P. Paradisi, A. Chechkin, G. Castellani, and G. Pagnini, Finite-energy Lévy-type motion through heterogeneous ensemble of Brownian particles J. Phys. A: Math. Theor. 52 (2019) 095601 (27pp).

14. A. S. Bodrova, A. V. Chechkin and I. M. Sokolov, Scaled Brownian motion with renewal resetting. Phys. Rev. E 100, 012120 (2019) (13pp.)

15. A. S. Bodrova, A. V. Chechkin and I. M. Sokolov, Nonrenewal resetting of scaled Brownian motion. Phys. Rev. E 100, 012119 (2019) (10 pp.)

16. V.V. Palyulin, G. Blackburn, M.A. Lomholt, N.W. Watkins, R. Metzler, R. Klages and A.V. Chechkin, First passage and first hitting times of Lévy flights and Lévy walks. New J. Phys. 21 (2019) 103028 (23pp.)

17. A.Padash, A.V. Chechkin, B. Dybiec, I. Pavlyukevich, B. Shokri and R. Metzler, First-passage properties of asymmetric Lévy flights. J. Phys. A: Math. Theor. 52 (2019) 454004 (48pp).

18. D.R.Gomes, A.A. Turkin, D.I.Vainchtein, J.T.M. De Hosson, Size-dependent ion-induced densification of nanoporous gold, Scripta Materialia 164 (2019) 17-20

19. D.R. Gomes, A.A. Turkin, D.I. Vainchtein, J.T.M. De Hosson, Bending of nanoporous thin films under ion radiation, Thin Solid Films 688, (2019) 137419.

20. O. Bakai, Three-state mesoscopic model of heterophase fluid in application to dielectric-semiconductor transformations in expanded mercury, Int. Conf. StatPhys 2019, L'viv , July 2019 (Invited talk)

21. O. Bakai, On the USA-Ukraine partnership in the nuclear power, Int. Workshop on US-Ukraine Cooperation on Education in Advanced Nuclear Science and Engineering, August, 2019, Washington, (Invited talk).

22. O. Bakai , Heterophase nature of mercury and its manifestation at the gas-liquid and metal-nonmetal transitions , Bogolyubov Int. Conf “Problems of Theoretical and Mathematical Physics”, Kyiv, Sept 2019 (Invited talk)

23. V. Kotlyar, Single heavy quark polarization. French-CERN-Ukrainian school of high energy and medical physics (March 18-22, V.N. Karazin Kharkiv National University), 2019

24. V. Kotlyar, Polarized charm and bottom quark production in proton-proton collisions at the LHC. New Trends in High-Energy Physics, Odessa, May 12-18, 2019.

25. В.В. Котляр, А.С. Сафронов, Механизмы рождения пар топ и анти-топ кварков в столкновениях ультрарелятивистских протонов. Тезисы докладов на XVII Конференции по физике высоких энергий и ядерной физике, (26-29 марта 2019 г.), Харків, ННЦ ХФТІ, p. 36.

26. В.В. Котляр, Р.М. Тимченко, Рождение боттом кварков, мезонов и барионов в рассеянии протонов ядрами. Тезисы докладов на XVII Конференции по физике высоких энергий и ядерной физике (26-29 марта 2019 г.), Харків, ННЦ ХФТІ, p. 37.

27. A.V.Shebeko, Relativistic nuclear calculations in the clothed-particle representation, Talk at LXIX International Conference "Nucleus-2019" on Nuclear Spectroscopy and Nuclear Structure. "Fundamental Problems of Nuclear Physics, Nuclei at Borders of Nucleon Stability, High Technologies", Dubna-2019, July.

28. A.Shebeko, A. Arslanaliev, A Fresh Look at Treatment of Radiative Capture in Nuclear Reactions: Applications to the alpha-alpha Bremsstrahlung, Proceedings of the 22nd International Conference on Few-Body Problems in Physics (Eds: N.A. Orr, M.Ploszajczak, F.M.Marques, J.Carbonell), Springer, 2019

29. A.Shebeko, A. Arslanaliev, Y. Kostylenko, QED in the Clothed-Particle Representation, Recent Progress in Few-Body Physics: Proceedings of the 22nd International Conference on Few-Body Problems in Physics (Eds: N.A. Orr, M.Ploszajczak, F.M.Marques, J.Carbonell), Springer, 2019

30. Y. A. Kostylenko, A. M. Arslanaliev, A. V. Shebeko, QED in the clothed-particle representation: a fresh look at positronium properties treatment, 24th European Conference on Few-Body Problems in Physics (EFB24), (02-06 Sep 2019. Surrey, UK), to be published in SciPost Physics Proceedings

31. A.M. Arslanaliev, A.V. Shebeko, An Accurate Allowance for Initial and Final State Interactions in the Treatment of the Alpha-Alpha Bremsstrahlung, 24th European Conference on Few-Body Problems in Physics (EFB24), 02-06 Sep 2019. Surrey, UK, to be published in SciPost Physics Proceedings

32. A.Chechkin, Brownian yet non-Gaussian diffusion. 10th Int. Conf. Engineering of Chemical Complexity. June 03-06, 2019, Potsdam (invited talk).

33. A.Chechkin, Brownian yet non-Gaussian diffusion in heterogeneous environment. Int. Workshop “Stochastic Processes and Pattern Formation”. September 13, 2019, Skolkovo (invited talk).

34. A.Chechkin, Normal and Fractional Brownian yet non-Gaussian Diffusion. 2nd Bad Wildbad Meeting on Random Processes and Applications, Königs Karls Bad, September 23-25 2019 (invited talk).

35. A.Chechkin, From first passage and arrival for alpha-stable random motion to efficiency and reliability for Lévy flight random search. Int. Workshop "Stochastic Modeling of Complex Systems'', December 6-7, 2019, Wroclaw (invited talk).

X. Заключні відомості

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

Перелік осіб-виконавців

Бакай Олександр Степанович
(д. ф.-м. н., 01.04.02)

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

Котляр Володимир Вікторович

Лаврова Галина Миколаївна

Лазарєв Микола Павлович
(к. ф.-м. н.)

Олексієчкін Микола Васильович
(к. ф.-м. н.)

Степановський Юрій Петрович
(к. ф.-м. н.)

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

Фатєєв Михайло Петрович
(к. ф.-м. н.)

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

Шебеко Олександр Вікторович
(д. ф.-м. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів — Борисенко О. О.

Телефон — +380573356203

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

