Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0218U001451

Державний реєстраційний номер: 0115U000638

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-02-2018

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Вплив дефектної структури на пороутворення, течію решітки та на конкуренцію фаз при взаємній дифузії

Початок етапу: 01.2015

Закінчення етапу: 12.2017

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

Код за ЄДРПОУ: 02125622

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: (0472) 37-21-42 , (0472) 35-44-63

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки

Код за ЄДРПОУ: 37536162

Місцезнаходження: пр-т Перемоги, 10, м. Київ, Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 406-82-00, 406-83-80

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): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 433.984

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вплив дефектної структури на пороутворення, течію решітки та на конкуренцію фаз при взаємній дифузії

Назва роботи англійською:

Influence of defect structure on voiding, lattice flow and on phase competition during interdiffusion

Реферат українською:

Вперше експериментально досліджений вплив попередньої обробки мідної підложки на кількість, розмір та просторовий розподіл пор, що виникають у фазовому прошарку Cu3Sn в процесі твердофазної реакції міді з оловом або з фазою Cu6Sn5. Порівняння зроблене для мідних підкладок після тривалого відпалу, після прокатки різного ступеню, для підкладок, нанесених гальванічним методом із різними густинами струму. Розподіл пор вздовж інтерфейсу відхиляється від пуасонівського. Утворюються локальні скупчення пор, що свідчить про вплив орієнтації окремих зерен на нуклеацію пор. Конкуруючими факторами впливу на пористість у фазі Cu3Sn при реакції міді з припоєм є середній розмір зерен і густина дислокацій. Показано, що збільшення дефектності підкладки призводить до більшої загальної кількості пор, але відносна частка пор, пінінгованих рухомим інтерфейсом Cu3Sn/Cu, зменшується. Створена теорія пінінгування пор градієнтом концентрації вакансій біля інтерфейсу. Вперше побудована модель індукованого зовнішніми потоками утворення пористості другого типу у вигляді ламелярної губчатої структури. Методами молекулярної динаміки на прикладі системи нікель-алюміній зпрогнозована залежність кінетики реакцій між покриттям і підкладкою та послідовності фазоутворення від умов нанесення покриття. Остаточно доведено утворення рідких каналів між зернами фази Cu6Sn5 як основного механізму масоперенесення в реакції міді з рідким припоєм. Пористість у реакціях мідь-олово можна побороти, якщо пригнітити ріст фази Cu3Sn, в якій зазвичай пори і виникають. Визначено умови пригнічення фазою Cu6Sn5 латерального розростання фази Cu3Sn. Розроблена комп'ютерна модель конкуренції проміжних фаз у процесах СВС-реакцій із частковим тепловідведенням. Знайдена залежність форми температурного профілю у фронті СВС від послідовності фазових перетворень і морфології реакційної зони. Визначено, що в достатньо тонких плівках реакція може протікати без утворення і конкуренції проміжних сполук, а шляхом розчинення нікелю в рідкому алюмінії до формування стехіометричного складу з наступною кристалізацією. Створений новий спосіб атомістичного моделювання - Stochastic Kinetic Mean-Field (SKMF).

Реферат англійською:

The influence of pre-treatment of copper substrate on the quantity, size and spatial distribution of pores occurring in the phase layer of Cu3Sn during the solid-phase reaction of copper with tin or with the Cu6Sn5 phase was experimentally investigated. The comparison is made for copper substrates after prolonged annealing, after rolling of different degrees, for substrates, applied by a galvanic method with different current densities. The distribution of pores along the interface deviates from Poisson's one. The formation of local accumulation of pores indicates the influence of the orientation of individual grains on the nucleation of pores. The competing factors influencing the porosity in the Cu3Sn phase during copper and solder reaction are the average grain size and dislocation density. Increase of the defect density of the substrate leads to a larger total number of pores, but, on the other hand, the percentage of pores pinned by the mobile interface Cu3Sn / Cu, decreases. The kinetic model was first created, which explains this property by the so-called kinetic pining of pores in the gradient field of the concentration of vacancies near the interface. The model of the second type of porosity induced by the external flow induced by the lamellar spongy structure of Cu3Sn + pores was induced. The model allows for predicting the rate of formation of the structure and the characteristic dimensions of the lamellar structures through thermodynamic driving forces and coefficients of interphase and surface diffusion of tin. Molecular dynamics applied to the nickel-aluminum interaction, predicts the dependence of the reaction kinetics and the sequence of

phase formation on the conditions of film deposition. Formation of liquid channels between the grains of the Cu6Sn5 phase as the main mechanism of mass transfer in the reaction of copper with a liquid solder has been proved unambiguously, ending 15 years of discussions. Voiding in copper-tin reactions can be overcome if one suppresses the growth of the Cu3Sn, in which the pores usually occur. The conditions for the suppression by the Cu6Sn5 of lateral expansion of the Cu3Sn phase were first found. A computer model of intermediate phase competition in the SHS reactions in multi-layer foils with partial heat dissipation was developed. The dependence of the shape of the temperature profile on the front of the SHS on the sequence of phase transformations and the morphology of the reaction zone is found. In sufficiently thin films, the reaction itself can proceed without the formation and competition of intermediate compounds, but by dissolving nickel in liquid aluminum to the formation of a stoichiometric composition followed by crystallization. The new method for atomistic modeling - Stochastic Kinetic Mean-Field (SKMF) - is suggested.

Індекс УДК: 539.2;538.9-405;548, 538.9

Коди тематичних рубрик: 29.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Гусак Андрій Михайлович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Методи опису і прогнозування утворення і росту пор і проміжних фаз у контактній зоні матеріалів

Назва НТП англійською: Methods of description and prediction of voiding and phase formation and growth in the contact zone of materials

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: M72.1 - Дослідження й експериментальні розробки у сфері природничих та технічних наук, P85.4 - Вища освіта

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Створений комплекс феноменологічних та атомно-симуляційних моделей для опису і прогнозування впливу попередньої обробки та умов відпалу на кінетику і структуру пористості та фазоутворення. Зокрема, вперше описано явище пороутворення другого типу (ріст пористої ламелярної структури) на з'єднаннях мідь-олово. Розроблена феноменологічна схема і відповідне програмне забезпечення для опису і прогнозування одночасного росту проміжних фаз, перерозподілу вакансій та утворення, росту і руху пор в реакції мідь-олово. Розроблені моделі та програмне забезпечення конкурентного фазоутворення при СВС-реакціях у нанофольгах нікель-алюміній. Створена теорія та програмне забезпечення нового атомно-симуляційного методу SKMF.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2015-2017 рр.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Заклади вищої освіти, науково-дослідні установи

Перспективні ринки: Науково-технічні підприємтва України, Європи, Китаю, Тайваню

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 2000

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація: по договору

IX. Бібліографічний опис

I. Перелік публікацій, що індексуються БД Scopus або WoS: 1. O.Y. Liashenko, A.M. Gusak, F. Hodaj. Spectrum of heterogeneous nucleation modes in crystallization of Sn-0.7wt%Cu solder: experimental results versus theoretical model calculations. J. Mater. Sci. - Mater. Electron. 2015. №11. С. 8464-8477; 2. A.M. Gusak, F. Hodaj, O.Y. Liashenko. Criteria of kinetic suppression of lateral growth of intermediate phases. Philos. Mag. Lett. 2015. №2. С. 110-121; 3. Erdelyi Z., Pasichnyy M., Bezpalchuk V., Toman J.J., Gajdics B., Gusak A.M. Stochastic kinetic mean field model. Comput. Phys. Commun. 2016, V. 204, P. 31-37; 4. A. Gusak, T. Zaporozhets, J. Janczak-Rusch. Kinetic pinning versus capillary pinning of voids at the moving interface during reactive diffusion. Philos. Mag. Lett, 2017. V. 97. №. 1. С. 1-10; 5. K.N. Tu, A.M. Gusak. A Ccomparison between complete and incomplete cellular precipitations. Scripta Mater. 146 (2018) 133-135; 6. A.M. Gusak, C. Chen, K.N. Tu. Flux-driven cellular precipitation in open system to form porous Cu3Sn. Philos. Mag. 2016, V. 96(13), P. 1318-1331; 7. V.M. Bezpalchuk, S.V. Marchenko, O.M. Rymar, O.O. Bogatyryov, A.M. Gusak. Problem of a choice of the first phase in reaction between nanofilms of nickel and aluminium. Metallofiz. Noveishie Tekhnol. 2015. №1. С. 87-102; 8. T.V. Zaporozhets, N.V. Storozhuk, A.M. Gusak. Competition of Voiding and Kirkendall Shift during Compound Growth in Reactive Diffusion - Alternative Models. Metallofiz. Noveishie Tekhnol. V. 38(2016), №10, p. 1279-1292; 9. Безпальчук В.М., Гусак А.М. Узагальнення кінетичного середньопольового методу на вакансійний механізм і його застосування до опису спінодального розпаду. Металлофизика и новейшие технологии. 2015, т. 37, № 12, сс. 1583-1593; 10. В.М. Безпальчук, М.О. Пасічний, А.М. Гусак. Застосування стохастичного кінетичного середньопольового (SKMF) методу до впорядкування атомів заміщення в макро- та нанорозмірних ГЦК-ґратницях. Металлофиз. новейшие технол. 2016, т. 38, № 9, сс. 1135-1144; 11. Bezpalchuk V.M.,Kozubski R.,Gusak A.M. Simulation of the tracer diffusion, bulk ordering, and surface reordering in F.C.C. structures by kinetic mean-field method. Uspehi Fiziki Metallov.-2017, V.18, #3, 205-234; 12. A.M. Gusak, S.V. Marchenko, V.V. Turlo, A.O. Bogatyrev. Modeling of Entropy Production and Self-Organization of Decomposing Metallic Alloy Under High Current Density. Український фізичний журнал, т.62(2017), №12; 13. V.M.Bezpalchuk, D.S. Rusenko, A.M. Gusak, Influence of the Intermediate Nanointerlayer on a Kinetics of Phase Formation and Ordering in Thin Films - Mean-Field Kinetic Simulation. Metallofiz. Noveishie Tekhnol, т. 39(2017), с. 865-879; 14. Liashenko O.Y., Hodaj F. Differences in the interfacial reaction between Cu substrate and metastable supercooled liquid Sn-Cu solder or solid Sn-Cu solder at 222°C: Experimental results versus theoretical model calculations. Acta Mater. 2015. Т. 99. С. 106-118; 15. Danielewski M., Gusak A., Bozek B., & Zajusz M. Model of diffusive interaction between two-phase alloys with explicit fine-tuning of the morphology evolution. Acta Mater. 108(2016), 68-84; 16. A. Gusak, B. Wierzba, M. Danielewski. Electromigration revisited: Competition between Kirkendall shift and backstress in pure metals and two-phase alloys. Philos. Mag. 2015. С. 1-12; 17. Turlo V., Politano O., Baras F. Modeling self-sustaining waves of exothermic dissolution in nanometric Ni-Al multilayers. Acta Mater. 2016. Т. 120. С. 189-204; 18. B.B. Straumal, I. Konyashin, B. Ries, A.B. Straumal, A.A. Mazilkin, K.I. Kolesnikova, A.M. Gusak, B. Baretzky. Pseudopartial wetting of WC/WC grain boundaries in cemented carbides. Mater. Lett. 2015. №147. С. 105-108; 19. B.B. Straumal, A.A. Mazilkin, X. Sauvage, R.Z. Valiev, A.B. Straumal, A.M. Gusak. Pseudopartial Wetting of Grain Boundaries in Severely Deformed Al-Zn Alloys. Russian Journal of Non-Ferrous Metals. 2015. №6. С. 44-50; 20. Запорожец Т.В., Король Я.Д. Подход обратной задачи для прогнозирования характеристик самораспространяющегося высокотемпературного синтеза в многослойных фольгах с учётом конкурентного фазообразования. Металлофизика и новейшие технологии. 2016. Т. 38, № 11. С. 1541-1560; 21. Rui X., Tang Y., Malyi O.I., Gusak A., Zhang Y., Niu Z., ... and Yan Q.. Ambient dissolution-recrystallization towards large-scale preparation of V2O5 nanobelts for high-energy battery applications. Nano Energy, 22(2016), 583-593; II. Перелік публікацій у фахових виданнях: 22. О.М. Римар, А.М. Гусак. Застосування середньопольового кінетичного методу до опису реакційної дифузії. Фізика і хімія твердого тіла, 2016, Т. 17, № 4, СС. 594-598; 23. Bezpalchuk V., Gusak A., Kozubski R. Correlations between phase formation morphology and sequence with the temperature profile of exothermic solid-state reactions. Cherkasy University bulletin: Physical and mathematical sciences, 2016, V. 16, P. 3-11; 24. В.М. Безпальчук, О.О. Богатирьов, А.М. Гусак. Комп'ютерне моделювання дифузії мічених атомів в упорядкованому сплаві з L12 структурою.

Вісник Черкаського університету. Серія "Прикладна математика. Інформатика". 2016. № 1-2; 25. Gusak A., Leszczynski H., Danielewski M., Klochay V. "Zero stability" of the two-phase systems and random walk in the composition space. Cherkasy University Bulletin: Physical and Mathematical Sciences, 2016, 349(16); III. Перелік опублікованих монографій, підручників, посібників: 26. Gusak A., Storozhuk N. Diffusion-controlled phase transformations in open systems. Handbook of Solid State Diffusion: Practice and Applications. V. 2, Chapter 2. Publisher: Elsevier 2017; 27. A.M. Gusak, R. Kozubski, D. Tyshchenko. Grain Growth in Open Systems. Diffusion Foundations, 2015. vol. 5. С. 229-244; 28. В. Безпальчук, О.Богатирьов, А. Гусак. Моделі твердофазних реакцій - від молекулярної динаміки до середньопольового кінетичного методу. Черкаси: ЧНУ, 2017; 29. В. Турло. Молекулярно-динамічне вивчення реакцій у мультишарових нано-фольгах Ni-Al. Черкаси: ЧНУ, 2017; 30. А.М. Гусак, Т.В. Запорожець, Н.В. Сторожук. Фізика наноматеріалів. Посібник для магістрантів. Черкаси: ЧНУ, 2016; IV. Перелік тез доповідей у матеріалах міжнародних конференцій: 31. J. Janczak-Rusch, L. Jeurgens, A. Gusak, M. Pasichnyy, O. Liashenko. Application of the critical gradient concept to first phase formation in Cu/Sn nano-multilayered systems. Abstracts of The European Congress and Exhibition on Advance Materials and Processes Euromat 2015. Warsaw, 2015. C2.2-PTHU-P2; 32. M. Pasichnyy, A. Gusak. Fundamentals of competing phase formation at reacting interfaces. Abstracts of The European Congress and Exhibition on Advance Materials and Processes Euromat 2015. Warsaw, 2015. C2.2- I/K-TUE-AM2-1; 33. Z. Erdelyi, M. Pasichnyy, V. Bezpalchuk, J.J. Toman, B. Gajdics, A. Gusak. Stochastic kinetic mean field model. EMRS 2016 Fall, Symposium U (Computer modeling in nanoscience and nanotechnology: an atomic-scale perspective), 19-22 September, 2016.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Черевко Олександр Володимирович

Перелік осіб-виконавців

Безпальчук Володимир Миколайович

Запорожець Тетяна Василівна

Король Ярослав Дмитрович

Ляшенко Олексій Юрійович

Ляшенко Юрій Олексійович

Марченко Станіслав Віталійович

Пасічний Микола Олександрович

Сторожук(Тютюнник) Надія Вікторівна

Сущенко Ігор Віталійович

Турло Владислав Васильович

Тютенко Василь Михайлович

Царенко Максим Васильович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

