Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0215U006255

Державний реєстраційний номер: 0112U000724

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 09-02-2015

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Пороутворення у наносистемах з радіальною симетрією - від феноменологічного опису до комп'ютерної симуляції

Початок етапу: 01.2012

Закінчення етапу: 12.2014

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

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.): 232

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Пороутворення у наносистемах з радіальною симетрією - від феноменологічного опису до комп'ютерної симуляції

Назва роботи англійською:

Process of void formation in nanosystems with radial symmetry - from phenomenological description to the computer simulations

Реферат українською:

Мета роботи - методами комп'ютерної симуляції на атомному рівні дослідити еволюцію пор у наносистемах з радіальною симетрією та вплив на пороутворення радіусу ядра системи, зовнішніх умов, можливості росту кристалічних фаз. Предмет дослідження - фазоутворення (зокрема пороутворення) у відкритих наносистемах з радіальною симетрією (з урахуванням потоків речовини і вакансій). Об'єкт дослідження - бінарні наносистеми "ядро-оболонка" з радіальною симетрією. У результаті феноменологічного опису і різномасштабного комп'ютерного моделювання створено теорію пороутворення у системах з радіальною симетрією. Встановлено, що утворення і стягування порожнистих нанооболонок є двома стадіями єдиного процесу еволюції системи "ядро-оболонка" у результаті конкуренції та синергізму прямого й оберненого ефектів Кіркендала, ефектів Френкеля та Гіббса-Томсона. Доведено, що формування порожнистих нанооболонок шляхом реакційної дифузії (твердофазної реакції) контролюється швидким компонентом, а стягування - повільним; існує критичний розмір частинок, нижче якого пороутворення стає неможливим. Знайдено критерії стійкості та способи прогнозування часів життя нанооболонок. Ключові слова: пори, вакансії, потоки, наночастинки, нанотрубки, нанооболонки, атомістичне моделювання, ефект Кіркендала, ефект Френкеля, ефект Гіббса-Томсона.

Реферат англійською:

Purpose of the research – investigation (by computer simulation at the atomic level.) of evolution of the pores in nanosystems with radial symmetry and influence of the core radius of the system, external conditions, and of possibility of crystalline phases growth on pore formation. The subject of the research - phase formation (in particular, pore formation) in open nanosystems with radial symmetry (with the flows of matter and vacancies). The object of research - binary "core-shell" nanosystems with radial symmetry. As a result of the phenomenological description and multiscale computer modeling the theory of pore formation in systems with radial symmetry was developed. The formation and shrinkage of hollow nanoshells are two stages of a single process of the evolution of the "core-shell" system as a result of competition and synergy of Kirkendall effect, Frenkel effect and the Gibbs-Thomson effect. It is proved that the formation of hollow nanoshells by reactive diffusion (solid state reaction) is controlled by a fast component but shrinkage is controlled by slow competition; there exists a critical particle size below which the pore formation becomes impossible. The criteria of stability and ways to predict the nanoshells lifetimes are found. Key words: pores, vacancies, fluxes, nanoparticles, nanotubes, nanoshells, atomistic simulations, Kirkendall effect, Frenkel effect, Gibbs-Thomson effect.

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

Коди тематичних рубрик: 29.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Запорожець Тетяна Василівна

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Теорія та моделі процесу пороутворення у наносистемах з радіальною симетрією

Назва НТП англійською: Theory and models of the process of voids formation in nanosystems with radial symmetry

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: K73.10 - Дослідження і розробки в галузі природничих та технічних наук, M80.30 - Вища освіта, M80.22.0 - Професійно-технічна освіта

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: У науково-дослідній роботі та циклі статей за її результатами створено теорію та моделі пороутворення у системах з радіальною симетрією. Встановлено, що утворення і стягування порожнистих нанооболонок є двома стадіями єдиного процесу еволюції системи "ядро-оболонка" у результаті конкуренції та синергізму прямого й оберненого ефектів Кіркендала, ефектів Френкеля та Гіббса-Томсона. Доведено, що формування порожнистих нанооболонок шляхом реакційної дифузії (твердофазної реакції) контролюється швидким компонентом, а стягування - повільним; існує критичний розмір частинок, нижче якого пороутворення стає неможливим. Знайдено критерії стійкості та способи прогнозування часів життя нанооболонок.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2013 - 2016 рр.

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Інститути НАНУ

Перспективні ринки: Україна

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

[1] Gusak A. M. Interaction between Inverse Kirkendall Effect and Kirkendall Effect in Nanoshells and Nanowires / A. M. Gusak, T. V. Zaporozhets // (Chapter 6) in Silicon and Silicide Nanowires - Applications, Fabrication and Properties by King-Ning Tu (UCLA, USA), Yu Huang (UCLA, USA) Print ISBN: 9789814303460 PanStanford Publishing, 2013. - 400 p. - P. 245 - 323. [2] Gusak A. Influence of Limited Efficiency and Competition of Vacancy Sinks/Sources on the Diffusion-Controlled Intermediate Phase Growth / A. Gusak, S. Kornienko, N. Storozhuk, T. Zaporozhets // Diffusion Foundations. - 2014. - V. 2. - P. 141-158. [3] Сторожук Н. В. Кинетика вакансий и пор в дифузионно контроллированных процессах / Н. В. Сторожук, Т. В. Запорожец, А. М. Гусак. - Черкаси: ФОП Гордієнко Є.І., 2014. - 142 с. [4] Гусак А. М., Запорожец Т. В. Фізика твердого тіла - посібник (подано до друку) [5] Storozhuk N.V. Mean-field and quasi-phase-field models of nucleation and phase competition in reactive diffusion / N.V. Storozhuk, K.V.Sopiga, A.M. Gusak // Philosophical Magazine. - 2013. - Vol. 93, # 16. - P. 1999-2012. [6] Gusak A.M. Competition of K and F sinks during void formation / A.M. Gusak, N.V. Storozhuk // The Physics of Metals and Metallography. - 2013. - Vol. 114, #3. - P. 197-206. [7] Zaporozhets T. V., Podolyan O. N., and Gusak A. M. Growth Kinetics of Nanoshells of the Intermediate Phase with Allowance for Finite Reaction Rates at Interphase Boundaries / T. V. Zaporozhets // The Physics of Metals and Metallography. - 2014. - Vol. 115, No. 3. - P. 268-276. [8] Gusak A. Competition between Kirkendall shift and backstress in interdiffusion revisited - simple analytic model / A. Gusak, B.Wierzba, M. Danielewski // Philosophical Magazine. - 2014. - Vol. 94, # 10. - P. 1153-1165. [9] Запорожець Т. В. Модель стягування бінарних порожнистих нанооболонок / Т. В. Запорожець, О. М. Подолян, А. М. Гусак // МФиНТ. - 2012. - Том 34, №1. - С. 111-121. [10] Бондаренко В. В. Дослідження атомістичним методом Монте-Карло нестійкості нанодротинок на контактах з'єднань / В. В. Бондаренко, Я. Ю. Осипенко, М. О. Пасічний, Т. В. Запорожець // Вісник Черкаського університету. - 2012. - Том 229. - С. 47-58. [11] Запорожець Т. В. Кінетика дифузійного росту проміжних фаз у наносистемах з радіальною симетрією / Т. В. Запорожець // Вісник Черкаського університету. - 2012. - Том 231. - С. 38-52. [12] Сторожук Н.В. Атомовий модель конкуренції фаз при взаємній дифузії / Н.В. Сторожук, А.М. Гусак // Металлофизика и новейшие технологии. - 2012. - № 8. - С. 1145-1162. [13] Подолян О. М. Еволюція пор при реакційній дифузії у сферичних та циліндричних наночастинках / О. М. Подолян, Т. В. Запорожець, А. М. Гусак // УФЖ. - 2013. - Том 58, №2. - С.171-181. [14] Сторожук Н. В. Конкуренція ефектів Кіркендалла і Френкеля при реакційній дифузії / Н. В. Сторожук, А. М. Гусак // Металофізика і новітні технології. - 2013. - № 6. - С. 807-820. [15] Tian Tian, A.M.Gusak, O.Yu. Liashenko, Jung-Kyu Han, Daechul Choi, and King-Ning Tu, A New Physical Model for Life Time Prediction of Pb-free Solder Joints in Electromigration Tests, Proceedings of ECTC conference, San Diego, California, USA, DOI: 10.1109/ECTC.2012.6248915, 2012, Page(s): 741 - 746 [16] Turlo V.V. Model of phase separation and of morphology evolution in two-phase alloy / V.V. Turlo, A.M. Gusak, K.N. Tu // Pilosophical Magazine. - 2013. - Vol. 93, # 16. - P. 2013-2025. [17] Тютюнник Н.В. Роль нерівноважних вакансій у процесі спінодального розпаду / Н.В. Тютюнник, А.М. Гусак // УФЖ. - 2012. - Том 57, №6. - С. 629-636. [18] Пасичный Н. А. Исследование методом Монте-Карло неустойчивости нанопроволок на контактах соединений / Н. А. Пасичный, Т. В. Запорожец, А. М. Гусак, В. В. Бондаренко, Я. Ю. Осипенко // Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології. - 2014. - Том 12, №3. - С. 633-641.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Черевко Олександр Володимирович

Перелік осіб-виконавців

Гусак Андрій Михайлович

Запорожець Тетяна Василівна

Пасічний Микола Олександрович

Подолян Оксана Миколаївна

Сторожук Надія Вікторівна

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

