Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0222U002002

Державний реєстраційний номер: 0119U101646

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-02-2022

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 3

Назва етапу: Проведення термодинамічного опису системи Fe–Ti–Zr і в рамках CALPHAD-методу. Розробка бази даних параметрів моделей термодинамічних функцій змішування кристалічних фаз систем Fe–Cu–Ni–Ti–(Zr, Hf) і проведення розрахун¬ків в межах CALPHAD-методу з її використанням. Проведення теоретич¬ного аналізу та узагальнення результа¬тів досліджень.

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2021

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Донбаська державна машинобудівна академія

Код за ЄДРПОУ: 02070789

Місцезнаходження: вул. Академічна, буд. 72, м. Краматорськ, Донецька обл., 84313, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380626416809

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

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

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

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.): 253.420

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Експериментальні та теоретичні закономірності термодинаміки розплавів багатокомпонентних аморфоутворюючих систем перехідних металів.

Назва роботи англійською:

Experimental and theoretical regularities on thermodynamics of melts of multi-component glass forming transition metals systems.

Реферат українською:

Об'єкти досліджень: сплави системи Fe–Ti–Zr; сплави п'ятикомпонентних систем Fe–Cu–Ni–Ti–Zr і Fe–Cu–Ni–Ti–Hf. Цілі: моделювання фазових рівноваг та термодинамічних властивостей фаз системи Fe–Ti–Zr в рамках CALPHAD-методу; розробка бази параметрів моделей термодинамічних властивостей кристалічних фаз п'ятикомпонентних систем Fe–Cu–Ni–Ti–Zr і Fe–Cu–Ni–Ti–Hf; розрахунки в межах CALPHAD-методу метастабільних фазових перетворень за участю переохолоджених розплавів систем Fe–Cu–Ni–Ti–Zr і Fe–Cu–Ni–Ti–Hf; теоретичний аналіз та узагальнення результатів досліджень, визначення фундаментальних факторів, що впливають на аморфізацію розплавів. Методи досліджень: моделювання термодинамічних властивостей фаз в рамках математичних моделей і моделі асоційованого розчину, CALPHAD-метод для розрахунків фазових рівноваг. Результати: розроблено новий термодинамічний опис системи Fe–Ti–Zr, та розраховано ізотермічні перетини, політермічні перерізи, проекції поверхонь ліквідуса та солідуса діаграми стану системи, координати нонваріантних перетворень і реакційну схему системи; розроблено базу для моделювання термодинамічних властивостей розплавів та кристалічних фаз п'ятикомпонентних систем Fe–Cu–Ni–Ti–Zr і Fe–Cu–Ni–Ti–Hf; в рамках CALPHAD-методу прогнозовані концентраційні області отримання швидкозагартованих аморфних сплавів Fe–Ni–Ti, Fe–Ni–Zr, Fe–Ni–Hf, Fe–Ti–Zr, чотири- та п'ятикомпонентних систем Fe–Cu–Ni–Ti–Zr і Fe–Cu–Ni–Ti–Hf; визначено фундаментальні фактори, що впливають на аморфізацію розплавів досліджених систем. Сфера застосування: дослідження в галузі фізико-хімічної теорії розплавів та фазових рівноваг; розробка нових технологій синтезу аморфних та високоентропійних сплавів; дослідження і розробки в галузі хімічного і фізичного матеріалознавства.

Реферат англійською:

Subjects of investigations: alloys of Fe–Ti–Zr system; alloys of five-component Fe–Cu–Ni–Ti–Zr and Fe–Cu–Ni–Ti–Hf systems. Objectives: modeling of phase equilibria and thermodynamic properties of the phases of the Fe–Ti–Zr system within the framework of the CALPHAD method; development of the database of parameters of models of thermodynamic properties of solid solutions of five-component systems Fe–Cu–Ni–Ti–Zr and Fe–Cu–Ni–Ti–Hf; calculations within the framework of the CALPHAD method of metastable phase transformations with the participation of supercooled melts of the Fe–Cu–Ni–Ti–Zr and Fe–Cu–Ni–Ti–Hf systems; theoretical analysis and generalization of results of investigations, determination of fundamental factors influencing the amorphization of liquid alloys. Research methods: modeling of thermodynamic properties of phases in the framework of mathematical models and models of associated solution, CALPHAD-method for calculations of phase equilibria. Results: a new thermodynamic assessment of the Fe–Ti–Zr system was developed, and calculated isothermal and polythermal sections, projections of liquidus and solidus surfaces of the phase diagram, coordinates of nonvariant transformations, reaction scheme of the Fe–Ti–Zr system; database for modeling the thermodynamic properties of liquid alloys and solid solutions of five-component Fe–Cu–Ni–Ti–Zr and Fe–Cu–Ni–Ti–Hf systems were developed; concentration regions for the production of rapidly quenched amorphous alloys of Fe–Ni–Ti, Fe–Ni–Zr, Fe–Ni–Hf, Fe–Ti–Zr, four- and five-component Fe–Cu–Ni–Ti–Zr and Fe–Cu–Ni–Ti–Hf systems were predicted; fundamental factors influencing the amorphization of melts of the

studied systems are determined. Range of application: investigations in the field of physicochemical theory of liquid alloys and phase equilibria; development of new technologies for the synthesis of amorphous and high entropy alloys; research and development in the field of chemical and physical materials science.

Індекс УДК: 544.33, 544.341;544.344, 536.66:544.3:546.56’72’74’82’831’832

Коди тематичних рубрик: 31.15.25.07, 31.15.25.09

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Турчанін Михайло Анатолійович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Термодинамічний опис системи Fe–Ti–Zr в рамках CALPHAD-методу та її діаграма стану. База даних параметрів моделей термодинамічних функцій розчинних фаз систем Fe–Cu–Ni–Ti–Zr і Fe–Cu–Ni–Ti–Hf. Результати прогнозу концентраційних областей аморфізації три-, чотири- та п'ятикомпонентних розплавів Fe–Cu–Ni–Ti–Zr і Fe–Cu–Ni–Ti–Hf. Фундаментальні фактори, що впливають на здатність розплавів досліджуваних систем до аморфізації.

Назва НТП англійською: Thermodynamic assessment of the Fe–Ti–Zr system within framework of the CALPHAD method and its phase diagram. Database of parameters of models of thermodynamic functions of solid solutions of Fe–Cu–Ni–Ti–Zr and Fe–Cu–Ni–Ti–Hf systems. The predicted concentration regions of amorphization of three-, four-, and five-component Fe–Cu–Ni–Ti–Zr and Fe–Cu–Ni–Ti–Hf liquid alloys. Fundamental factors influencing the amorphization of liquid alloys of the studied systems.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Металургійне виробництво та виробництво готових металевих виробів. Дослідження і розробки в галузі природничих та технічних наук.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: В рамках CALPHAD-методу розроблено новий термодинамічний опис системи Fe–Ti–Zr, та розраховані ізотермічні перетини, політермічні перерізи, проекції поверхонь ліквідуса та солідуса діаграми стану системи, координати нонваріантних перетворень, реакційна схема системи. Створено базу даних параметрів моделей термодинамічних функцій розчинних фаз систем Fe–Cu–Ni–Ti–Zr і Fe–Cu–Ni–Ti–Hf. В рамках CALPHAD-методу прогнозовані концентраційні області отримання швидкозагартованих аморфних сплавів три-, чотири- та п'ятикомпонентних розплавів Fe–Cu–Ni–Ti–Zr і Fe–Cu–Ni–Ti–Hf. Проведено теоретичне узагальнення результатів досліджень та визначено фундаментальні фактори, що визначають здатність розплавів досліджених систем до аморфізації.

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: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Споживачі продукції: Вища освіта, наукові установи, що займаються дослідженнями в галузі фізико-хімічної теорії розплавів та фазових рівноваг.

Перспективні ринки: Україна

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. Velikanova T., Turchanin M., Agraval P. Copper–Titanium–Zirconium // Ternary Alloys. A Comprehensive Compendium of Evaluated Constitutional Data and Phase Diagrams Vol. 20. Selected Systems for Lead-free Soldering and Brazing Applications. – 2021 / Materials Science International Services GmbH, Stuttgart, Germany. – P. 463-502. – ISBN 978-3-932120-13-8.

2. Mikhail Turchanin, Pavel Agraval, Liya Dreval, Vodopyanova Anna Thermodynamics and chemical ordering of liquid Cu–Hf–Ni–Ti–Zr alloys //Journal of Phase Equilibria and Diffusion. – 2021. – С. 1-24. – DOI: https://doi.org/10.1007/s11669-021-00898-6;

3. Агравал П.Г. Термодинаміка і фазові перетворення в багатокомпонентних аморфоутворюючих системах перехідних металів. – Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора хімічних наук за спеціальністю 02.00.04 – фізична хімія. – Донбаська державна машинобудівна академія, Краматорськ, Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича НАН України, Київ, 2021. – 452 с.

4. Турчанін М. А., Агравал П. Г., Водоп'янова Г. О., Корсун В.А., Древаль Л. О. Ентальпії змішування рідких сплавів Co–Cu–Hf та закономірності зміни термодинамічних властивостей в ряду аморфоутворюючих розплавів Co–Cu–(Ti, Zr, Hf) // Перспективні технології, матеріали й обладнання в ливарному виробництві: матеріали VIII Міжнародної науково-технічної конференції, 21 – 24 вересня 2021 р. – Краматорськ : ДДМА, 2021. – С. 126–127.

5. Агравал П. Г., Турчанін М. А., Тимошенко О. А. Діаграма стану двокомпонентної системи Co–Ti // Перспективні технології, матеріали й обладнання в ливарному виробництві: матеріали VIII Міжнародної науково-технічної конференції, 21 – 24 вересня 2021 р. – Краматорськ : ДДМА, 2021. – С. 20–21.

6. Агравал П. Г., Турчанін М. А. Температурна залежність термодинамічних функцій змішування рідких сплавів аморфоутворюючих систем // Перспективні технології, матеріали й обладнання в ливарному виробництві: матеріали VIII Міжнародної науково-технічної конференції, 21 – 24 вересня 2021 р. – Краматорськ : ДДМА, 2021. – С. 10–12.

7. Турчанін М. А., Агравал П. Г., Водоп'янова Г. О. Закономірності зміни термодинамічних функцій змішування рідких сплавів в ряду трикомпонентних систем (Fe, Co, Ni, Cu)–Ti–Zr // Перспективні технології, матеріали й обладнання в ливарному виробництві: матеріали VIII Міжнародної науково-технічної конференції, 21 – 24 вересня 2021 р. – Краматорськ : ДДМА, 2021. – С. 124–125.

8. Agraval, P.Temperature–Composition Dependence of Thermodynamic Mixing Functions of Co–Cr–Cu–Fe–Ni Melt / P. Agraval, L. Dreval, M. Turchanin, A. Vodopyanova // Powder Met. Metall Ceram. – 2021. – Vol. 59, No. 11-12. – P. 703-714. – DOI https://doi.org/10.1007/s11106-021-00205-5

9. Турчанін М. А., Взаємодія компонентів аморфоутворюючих розплавів заліза та нікелю з титаном, цирконієм та гафнієм. Частина 1. Ентальпії змішування рідких сплавів / М. А. Турчанін, Л. О. Древаль, П. Г. Агравал, В. А. Корсун, Г. О. Водоп'янова // Порошкова металургія – 2021. – № 9/10. – С. 119-130.

10. Turchanin M., Mixing Enthalpy of the Co–Ti–Hf Liquid Alloys and Regularities of the Function Change in the Row of the Ternary (Co, Ni, Cu)–Ti–Hf Glass Forming Melts / M. Turchanin, P. Agraval, L. Dreval, A. Vodopyanova, V. Korsun // IV EastWest Chemistry Conference (EWCC), Oktober 7–9 2021. – P. 34.

11. Agraval P. Thermodynamic Mixing Functions of the Fe–Ni–Zr Liquid Alloys / P. Agraval, M. Turchanin, L. Dreval, A. Vodopyanova, V. Korsun // IV EastWest Chemistry Conference (EWCC), Oktober 7–9 2021. – P. 67.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Турчанін Михайло Анатолійович
д. х. н., 02.00.04

Перелік осіб-виконавців

Агравал Павло Гянович
(д. х. н.)

Водоп'янова Ганна Олександрівна
(к. х. н.)

Древаль Лія Олексадндрівна
(к. х. н.)

Корсун Владислав Анатолійович

Підченко Аліна Сергіївна

Турчанін Михайло Анатолійович
(д. х. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів Агравал Павло Гянович

Телефон +38 (062) 641-67-01

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

