

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U002017

Державний реєстраційний номер: 0121U109323

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-02-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Побудова моделей та виконання обчислювальних експериментів, які спрямовано на визначення, дослідження та прогнозування фізико-механічних властивостей і оптимізацію технологій одержання високоентропійних сплавів та композитних матеріалів на їх основі

Початок етапу: 01.2021

Закінчення етапу: 12.2023

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Кржижановського, буд. 3, м. Київ, 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380443908751

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, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 10287.936
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Побудова моделей та виконання обчислювальних експериментів, які спрямовано на визначення, дослідження та прогнозування фізико-механічних властивостей і оптимізацію технологій одержання високоентропійних сплавів та композитних матеріалів на їх основі

Назва роботи англійською:

Construction of models and performance of computational experiments aimed at determining, researching and forecasting physical and mechanical properties and optimization of technologies for obtaining high-entropy alloys and composite materials based on them

Реферат українською:

Об'єкт дослідження – високоентропійні сплави та композитні матеріали на їх основі. Мета роботи – розробка ефективних засобів комп'ютерного конструювання та оптимізації експлуатаційних характеристик високоентропійних сплавів і композитних матеріалів на їх основі на стадії проектування новітніх об'єктів із заданим комплексом властивостей. Методи досліджень – фізико-математичне та комп'ютерне моделювання на макрорівні (механіка суцільного середовища), мезорівні (методи фрактальної геометрії), мікрорівні (першопринципні розрахунки, методи молекулярної динаміки, нанокластерне моделювання). Розроблено і уточнено концепції та засади прогностичних моделей дослідження експлуатаційних властивостей для визначених класів матеріалів методами обчислювального експерименту. На основі першопринципних розрахунків встановлено можливість синтезу нової карбідної (TiZrHfV)C, нітридної (TiZrHfV)N і карбідно-нітридної (TiZrHfV)C_{0.5}N_{0.5} високоентропійної кераміки. Температура синтезу цих керамік становить 1716 К, 684 К та 166 К відповідно.

Реферат англійською:

The object of research is high-entropy alloys and composite materials based on them. The purpose of the work is to develop effective means of computer design and optimization of operational characteristics of high-entropy alloys and composite materials based on them at the stage of designing the latest objects with a given set of properties. Research methods are physical-mathematical and computer modeling at the macro-level (mechanics of a solid medium), meso-level (methods of fractal geometry), micro-level (first-principle calculations, methods of molecular dynamics, nanocluster modeling). Concepts and principles of prognostic models for the study of operational properties for certain classes of materials by methods of computational experiments were developed and refined. Based on first-principle calculations, the possibility of synthesis of new carbide (TiZrHfV)C, nitride (TiZrHfV)N and carbide-nitride (TiZrHfV)C_{0.5}N_{0.5} high-entropy ceramics was established. The synthesis temperature of these ceramics is 1716 K, 684 K and 166 K, respectively

Індекс УДК: 53.072;53:004, 519.713; 519.711:53

Коди тематичних рубрик: 29.03.77, 28.17.23

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Галанов Борис Олександрович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: с.н.с.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:Картузов Валерий Васильович

Науковий ступінь: к. ф.-м. н.

Вчене звання: С.Н.С.

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Врахування розмірного фактора в енергії електрон-іонної системи матеріалу

Назва НТП англійською: Taking into account the size factor in the energy of the electron-ion system of the material

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії, гіпотези

Галузь застосування: М.72.19 “Дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук”

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: За допомогою енергії електрон-іонної системи обчислюються фізико-механічні характеристики матеріалів (модуль пружності, міцність, температуру плавлення и т.д.), залежно від розмірного фактора.

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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Комп'ютерна програма Fraculator. Красіков І.В., Красікова І.Є. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір №114248. 2022 р.

Назва НТП англійською: Fraculator computer program. Krasikov I.V., Krasikova I.E. Certificate of copyright registration for the work No. 114248. 2022

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії, гіпотези

Галузь застосування: М 72.19 Дослідження і експериментальні розробки у сфері природничих і технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Програма для розрахунків фрактальних характеристик двовимірних зображень

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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. А.В. Хачатрян. Обчислення лінійного коефіцієнта термічного розширення багатоелементних, однофазних металевих сплавів з перших принципів. Успіхи матеріалознавства. 2021. Випуск 2. С. 10-18.
2. Д.А. Закарян, А.В. Хачатрян. Першопринципні методи обчислення лінійного коефіцієнта термічного розширення квазібінарних евтектичних систем. Успіхи матеріалознавства. 2021. Випуск 3. С. 38-47.
3. В.В.Лукович, В.В.Картузов. Потенціал в області мікронерівностей поверхні металу, який працює в режимі катодного захисту Успіхи матеріалознавства. 2021. Випуск 3. С. 48-54.
4. Ovsiannikova, L.I.; Lashkarev, G.V.; Kartuzov, V.V.; Myroniuk, D.V.; Dranchuk, M.V.; Ievtushenko, A.I. The study of the behavior of Al impurity in ZnO lattice by a fullerene like model. Physics and Chemistry of Solid State, 2021, v. 22, No. 2, pp. 204-208.
5. Валеева І.К. АДГЕЗІЙНИЙ КОНТАКТ ТІЛ З ВИКРИВЛЕНОЮ ЖОРСТКОЮ ПОВЕРХНЕЮ//ПРИКЛАДНА МЕХАНІКА Том 57, № 6, 2021. С. 6-13.
6. Zakarian D., Khachatrian A, Firstov S.. Universal temperature dependence of Young's modulus. MAG Online Library. Metal Powder Report, Elsevier. - Published Online:30 Sep. – 2021.

<https://doi.org/10.1016/j.mprp.2018.12.079>.

7. Ovsiannikova, L.I.; Lashkarev, G.V.; Kartuzov, V.V.; Myroniuk, D.V.; Dranchuk, M.V.; Ievtushenko, A.I. The study of the behavior of Al impurity in ZnO lattice by a fullerene like model. *Physics and Chemistry of Solid State*, 2021, v. 22, No. 2 (pp. 204-208). <https://doi.org/10.15330/pcss.22.2.204-208>.
8. Borodich F.M., Galanov B.A., Keer L.M., Suarez-Alvarez M.M. Contact probing of prerstressed adhesiye membrans of living cells. *Phill. Trans. R. Soc.A* 379: 20200289.
9. K.E. Korzhneva, V.L. Bekenev, O.Y. Khyzhun, A.A. Goloshumova, A.Y. Tarasova, M.S. Molokeev, L.I. Isaenko, A.F. Kurus. Single crystal growth and the electronic structure of $\text{Rb}_2\text{Na}(\text{NO}_3)_3$: Experiment and theory. *Journal of Solid State Chemistry*, 2021, vol. 294, id. 121910 (9 pp.). <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2020.121910>.
10. Contact Problems for Soft, Biological and Bioinspired Materials. Editors Feodor M. Borodich, Xiaoqing Jin, Chapter 1 Adhesion of Living cells: Mechanisms of adhesion and conyact models. Feodor M. Borodich, Boris A. Galanov, Leon M.Keer and Maria M. Suazer-Alvarez. Springer International Publishing, 2021. P 342, ISSN 2211-0593. <https://link.springer.com/book/9783030851743>.
11. Borodich FM, Galanov BA, Grigoriev ON. Adhesion and wear of diamond: formation of nanocracks and adhesive craters of torn out material. 2022. *Phil.Trans. R. Soc. A* 380: 20210341. <https://doi.org/10.1098/rsta.2021.0341>.
12. Milman Y.V., Galanov B.A., Goncharuk V.A., Voskoboinik I.V., Goncharova I. V. Determination of New Plasticity Characteristic of Alloys at Mechanical Compression and Tensile Tests and the Influence of Structural Factors on Plasticity. *Solid State Phenomena* ISSN:1662 – 9779, Vol.331, pp 11 – 24. doi:10.4028/p-43wx05.
13. Borodich F.M., Galanov B.A. Adhesive depth-sensing indentation tests: Slopes of the force – displacement curves. *Mechanic Research Communication*.126 (2022) 104008. <https://doi.org/10.1016/j.mechrescom.2022.104008>.
14. Borodich FM, Galanov BA, Keer LM, Suarez-Alvarez Maria M. Adhesion of living cells: Mechanisms of adhesion and contact models – глава 1 у книжці: Book: 978-3-030-85174-3: Contact Problems for Soft, Biological and Bioinspired Materials. – 2022.
15. O. Vasiliev, V. Muratov, P. Mazur, V. Bilyi, M. Karpets, V. Bekenev, V. Garbuz, T. Khomko, V. Kartuzov. Silicon in intericosahedra chains of boron carbide. *Journal of the European Ceramic Society*, 2022, Vol. 42, N 13, P. 5515-5521. <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2022.05.056>.
16. Zakarian D., Khachatryan A. Temperature dependence of the hardness of materials with a metallic, covalent-metallic bonds. *MAG Online Library. Metal Powder Report*. 2022. V. 76. No 6. P. 26–31. <https://www.magonlinelibrary.com/doi/epub/10.1016/S0026-0657%2821%2900300-3>.
17. V.Holovko, O.Shtofel, I.Krasikov. Fractal dimensions of the weld metal microstructure. Part 1. – *Norwegian Journal of development of the International Science*, 2023, 116, p.74-80. doi.org/10.5281/zenodo.834842.
18. V.Holovko, O.Shtofel, I.Krasikov. Fractal dimensions of the weld metal microstructure. Part 2. – *Norwegian Journal of development of the International Science*, 2023, 117, p.109-115. doi.org/10.5281/zenodo.838608.
19. Михайлов А.О., Штефан Є.В., Михайлов О.В. Моделювання процесів виготовлення тонкостінних втулок з поруватих заготовок з використанням прямого видавлювання та радіального ущільнення. *Успіхи матеріалознавства*. Київ: ІПМ ім. І. М. Францевича НАН України, 2023. № 7. С.19 – 26.
20. D. Zakarian, A. Khachatryan. Method for evaluating hardening in highly entropy equiatomic metal alloys. (Abstract, 4(FCM)). *International Conference on Advance in Functional Materials*, 2021, Los Angeles, USA, 18-20 Avgust, 2021.
21. A. Khachatryan, D. Zakarian. Temperature dependence of the physical and mechanical characteristics of borides and metal multielement alloys. (Abstract, 4(FCM)). *International Conference on Advance in Functional Materials*, 2021, Los Angeles, USA, 18-20 Avgust, 2021.

22. Luzhnyi I., Bekenev V., Denysyuk N., Khyzhun O. Electronic structure of Ti_4CdI_6 : First-principles calculations and X-ray photoelectron spectroscopy measurements. Book of Abstracts 7th International Materials Science Conference HighMatTech-2021, October 5-7, 2021 Kyiv, Ukraine. P. 44.
23. Denysyuk N., Bekenev V.L., Karpets M.V., Khyzhun O.Y., Luzhnyi I.V. DFT band-structure calculations and X-ray spectroscopy measurements of two different phases of Ti_3PbBr_5 . Book of Abstracts 7th International Materials Science Conference HighMatTech-2021, October 5-7, 2021 Kyiv, Ukraine. P. 66.
24. Milman Yu.V., Galanov B.A., Goncharuk V. A., Voskoboinik I. V., Goncharova I.V. Determination of New Plasticity Characteristic of Alloys in Mechanical Compression and Tension Tests, and the Influence of Structural Factors on Plasticity. Proceedings of the 7-th International Scientific Conference HighMatTech-2021, 5 – 7 жовтня 2021 рік, Київ, Україна, С.30.
25. Vasylkivska, M.A. Kartuzov, V.V.; Krapivka, N.A., Rozhenko, N.M.; Timofeeva, I.I. X-ray diffraction study of clustering in solid solution of multi-component alloys. 7-th International Samsonov Conference “Materials Science of Refractory Compaunds” (MSRC), May 25-28, 2021 Kyiv, Ukraine. P.55.
26. Валеева І.К. АДГЕЗІЙНИЙ КОНТАКТ ТІЛ З ВИКРИВЛЕНОЮ ШОРСТКОЮ ПОВЕРХНЕЮ // VI Міжнародна наукова конференція "СУЧАСНІ ПРОБЛЕМИ МЕХАНІКИ", МІНІСТРЕСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Київ, Україна, 30–31 серпня 2021, С. 15.
27. D. A. Zakarian, A. V. Khachatryan, V. V. Kartuzov . Ab Initio calculation of the melting point of borides, eutectic systems and multi-element metal alloys. (Abstract Submission ID: AMC-A6065). European Advanced Materials Congress (EAMC) during 25th June to 02 July 2022 in Italy, Genoa).
28. Михайлов А.О. Моделювання процесу отримання тонкостінних втулок методом прямого витискування пористих заготовок / Є. В. Штефан (НТУУ КПІ), О.В. Михайлов (18) // VII Міжнародна науково-технічна конференція з проблем вищої освіти і науки ТК-2022, «Прогресивні напрямки розвитку автоматичних технологічних комплексів»: 28-30 травня 2022 р. – Луцьк: ЛНТУ, 2022. С. 190-191.
29. D. A. Zakarian, A. V. Khachatryan, V. V. Kartuzov. Evaluation of the degree of solidsolution hardening of diborides of multielement metal composite materials. Nanotechnology and Nanomaterials (NANO-2022), Abstract Book. Lviv, Ukraine, 25-27 August 2022, P. 84.
30. Nataliia Rozhenko, Liubov Ovsianikova, Valery Kartuzov, Estimation of the Lattice Parameter and Distortion of Atoms Based on the Results of Ab initio Study of Structural Fragments of TiVZrNbMo , TiVZrNbTa , and TiVZrNbHf Multicomponent Equiatomic Alloys, Book of Abstracts 8th International Materials Science Conference HighMatTech-2023, October 2-6, 2023, Kyiv, Ukraine, P.151.
31. Nataliia Rozhenko, Liubov Ovsianikova, Valery Kartuzov, Estimation of the Lattice Parameter and Lattice Distortion Based on the Results of Ab initio Study of Structural Fragments of TiVZrNbMo , TiVZrNbHf , and TiVZrNbTa Multicomponent Alloys, 8th International Materials Science Conference HighMatTech-2023.
32. І.В. Красіков, І.Є. Красікова, В.В. Картузов. Вплив розмиття зображення структури матеріалу на визначення її мультифрактальних характеристик. — Луцьк, “Наукові нотатки”, 75, с. 146-153.
33. V.Holovko, O.Shtofel, I.Krasikova, I.Krasikov. Fractal analysis of the structure with non-metallic inclusions characteristics impact on the weld metal mechanical properties. — 8th International Materials Science Conference HighMatTech-2023, p. 156.
34. В.Головко, О.Штофель, І.Красіков. Фрактальні заміри структури металу зварних швів. ч.1. В Modern methods of solving scientific problems of reality. XXXIV International Scientific and Practical Conference. Warsaw, Poland, 2023. <https://doi.org/10.46299/ISG.2023.1.34>.
35. В.Головко, О.Штофель, І.Красіков. Фрактальні заміри структури металу зварних швів. ч.2. В Modern methods of solving scientific problems of reality. XXXV International Scientific and Practical Conference. Varna, Bulgaria, 2023. <https://doi.org/10.46299/ISG.2023.1.35>.

36. O.Shtofel, V.Holovko, I.Krasikov, I.Krasikova. Using of software methods to study the materials structure properties with inclusions. — Commission XII "Arc Welding Processes and Production Systems", 2023.
37. В.Головко, О.Штофель, І.Красіков, І.Красікова. Дослідження властивостей структури матеріалів з включеннями. — Materials and Technologies in Engineering (MTE-2023) Engineering, Materials, Technologies, Transport: Collection of Scientific Reports of the International Conference, Lutsk, Ukraine, May 16–18, 2023, p. 95–97.
38. В.Головко, О.Штофель, І.Красіков, І.Красікова. Застосування мультифрактальної параметризації у задачах металознавства на прикладі дослідження неметалевих включень. — 9-та Міжнародна конференція «Теоретичні і експериментальні дослідження в сучасних технологіях матеріалознавства та машинобудування», 2023, с. 164.
39. Повстяной О.Ю., Михайлов А.О., Штефан Є.В., Михайлов О.В. Визначення раціональної схеми пресування при виготовленні багат шарових фільтруючих елементів. Матеріали та технології в інженерії (МТІ-2023): інженерія, матеріали, технології, транспорт: збірник наукових доповідей міжнародної конференції, Луцьк, Україна, 16–18 травня 2023 р. Луцьк : Вежа-Друк, 2023. С.201–203.
40. Михайлов А.О., Каргузов В.В., Михайлов О.В. Моделювання когезійної взаємодії між пластичною матрицею та жорстким включенням. Теоретичні і експериментальні дослідження в сучасних технологіях матеріалознавства та машинобудування: збірник наукових доповідей IX міжнародної науково – практичної конференції. Луцьк : Вежа-Друк, 2023. С.195–196.
41. Mikhailov A., Shtefan Ye., Mikhailov O. The rational constructional and technological parameters determination method for powder materials forming processes. Book of Abstracts 8th International Materials Science Conference HighMatTech-2023, October 2–6, 2023, Kyiv, Ukraine. P. 140.

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Баглюк Геннадій Анатолійович

д. т. н., 05.16.06

Перелік осіб-виконавців

Єфімова Катерина Олександрівна
(к.ф.-м.н.)

Іванов Сергій Михайлович
(к.т.н., ст. наук .співр.)

Бабенко Павло Корнійович

Бекенцов Валерій Львович

Бублей Олександр Юрійович

Білий Владислав Олегович

Валеева Ірина Кимівна
(к. ф.-м. н., ст. наук .співр.)

Васільєв Олександр Олексійович
(к. х. н., доцент, 02.00.04)

Галанов Борис Олександрович
(д. ф.-м. н., с.н.с., 01.02.04)

Дмитрук Людмила Йосипівна

Дмитрієв Денис Олександрович

Закарян Дора Арамаїсівна
(д.ф.-м.н., ст. наук .співр., 01.04.07)

Заїкіна Тетяна Костянтинівна

Кабанець Валентина Дмитрівна

Картузов Валерій Васильович
(к.ф.-м.н., с.н.с., 01.01.02, 05.02.01)

Картузова Лариса Миколаївна

Коваленко Марія Петрівна

Красіков Ігор Володимирович
(к.т.н., ст.н.с.)

Красіков Антон Ігоревич

Красікова Ірина Євгеніївна
(к. ф.-м. н.)

Лукович Володимир Васильович
(д. т. н., ст. наук .співр.)

Медюх Назарій Романович
(105)

Михайлов Анатолій Олегович
(д.філософ)

Могила Наталія Володимирівна

Овсяннікова Любов Іванівна

(к.ф.-м.н., ст. наук .співр.)

Роженко Наталія Миколаївна

(к.ф.-м.н.)

Севрук Юлія Миколаївна

Хачатрян Айк Вачаганович

(к.ф.-м.н.)

Чечель Олександр Васильович

(к.т.н.)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

Миронюк Денис Валерійович

Юрченко Тетяна Анатоліївна

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**



Юрченко Тетяна Анатоліївна