Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U102652

Державний реєстраційний номер: 0119U101646

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-02-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Експериментальне калориметричне дослідження ентальпій змішування та моделювання термодинамічних властивостей розплавів систем Fe–Ni–Hf і Fe–Ti–Zr та опис результатів в рамках моделі асоційованого розчину. Проведення термодинамічного опису системи Fe–Ni–Ti в рамках CALPHAD-методу.

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітного документа: Проміжний 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: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 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.): 258.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Експериментальні та теоретичні закономірності термодинаміки розплавів багатокомпо-нентних 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: розплави трикомпонентних систем Fe–Ni–Zr, Fe–Ni–Hf і Fe–Ti–Zr, розплави чотири- та п’ятикомпонентних систем Fe–Cu–Ni–Ti–Zr і Fe–Cu–Ni–Ti–Hf, термодинамічні властивості фаз та фазові рівноваги системи Fe–Ni–Ti. Цілі: експериментально визначити ентальпії змішування розплавів Fe–Ni–Zr, Fe–Ni–Hf, Fe–Ti–Zr та описати їх концентраційну залежність; виконати моделювання термодинамічних властивостей та ближнього хімічного порядку розплавів Fe–Ni–(Ti, Zr, Hf), Fe–Ti–Zr; розробити базу параметрів моделей та виконати моделювання термодинамічних властивостей та ближнього хімічного порядку розплавів чотири- та п’ятикомпонентних систем Fe–Cu–Ni–Ti–Zr і Fe–Cu–Ni–Ti–Hf в рамках моделі асоційованого розчину; провести моделювання фазових рівноваг та термодинамічних властивостей фаз системи Fe–Ti–Zr в рамках CALPHAD-методу. Методи досліджень: високотемпературна ізоперибolічна калориметрія, математичні та феноменологічні моделі термодинамічних властивостей розплавів; CALPHAD-метод для розрахунків фазових перетворень систем. Результати: парціальні та інтегральні ентальпії змішування компонентів розплавів Fe–Ni–Zr, Fe–Ni–Hf і Fe–Ti–Zr; параметри моделі асоційованого розчину для рідких сплавів Fe–Ni–(Ti, Zr, Hf), Fe–Ti–Zr; база для моделювання термодинамічних властивостей розплавів чотири- та п’ятикомпонентних систем Fe–Cu–Ni–Ti–Zr і Fe–Cu–Ni–Ti–Hf; склад асоційованого розчину та спрогнозовані концентраційні області отримання швидкозагартованих аморфних сплавів Fe–Ni–(Ti, Zr, Hf), Fe–Ti–Zr, чотири- та п’ятикомпонентних систем Fe–Cu–Ni–Ti–Zr і Fe–Cu–Ni–Ti–Hf; термодинамічний опис системи Fe–Ni–Ti, та розраховані ізотермічні перетини, політермічні перерізи, проекції поверхонь ліквідусу та солідусу діаграми стану системи, координати нонваріантних перетворень, створено реакційну схему. Сфера застосування: тонкий металургійний синтез; розробка нових технологій синтезу аморфних та високоентропійних сплавів; дослідження і розробки в галузі матеріалознавства.

Реферат англійською:

Subjects of investigations: melts of the Fe–Ni–Zr, Fe–Ni–Hf and Fe–Ti–Zr system, melts of the quaternary and quinary Fe–Cu–Ni–Ti–Zr and Fe–Cu–Ni–Ti–Hf systems, thermodynamic properties of phases and phase equilibria of the Fe–Ni–Ti system. Objectives: experimental study of the thermodynamic properties of the Fe–Ni–Zr, Fe–Ni–Hf and Fe–Ti–Zr melts; modeling the thermodynamic properties and the short range order in the Fe–Ni–(Ti, Zr, Hf), Fe–Ti–Zr melts; database for the modeling of thermodynamic properties of quaternary and quinary Fe–Cu–Ni–Ti–Zr and Fe–Cu–Ni–Ti–Hf melts within the framework of associated solution model; modeling of phase equilibria and thermodynamic properties of phases of the Fe–Ni–Ti system using the CALPHAD method. Research methods: high-temperature isoperibolic calorimetry, mathematical and phenomenological models of thermodynamic properties of melts; CALPHAD-method for calculations of phase transformations of systems. Results: the partial and integral enthalpy of mixing of the Fe–Ni–Zr, Fe–Ni–Hf and Fe–Ti–Zr melts; the parameters of the associate solution models for the Fe–Ni–(Ti, Zr, Hf), Fe–Ti–Zr liquid alloys; the database for modeling of the thermodynamic properties of melts of four- and five-component Fe–Cu–Ni–Ti–Zr and Fe–Cu–Ni–Ti–Hf systems; the calculated composition of the associated solution and the estimated concentration regions for the production of rapidly quenched amorphous alloys of the Fe–Ni–(Ti, Zr, Hf), Fe–Ti–Zr, quaternary and quinary Fe–Cu–Ni–Ti–Zr and Fe–Cu–Ni–Ti–Hf systems; the thermodynamic assessment of the Fe–Ni–Ti system, and calculated isothermal

and polythermal sections, projections of liquidus and solidus surfaces of the phase diagram of the system, coordinates of nonvariant transformations, reaction scheme. Range of application: fine metallurgical synthesis; development of new technologies for synthesis of amorphous and high entropy alloys; research and development in the field of 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: Парціальні та інтегральні ентальпії змішування компонентів розплавів Fe–Ni–Zr, Fe–Ni–Hf, Fe–Ti–Zr. Параметри математичні моделей, моделі асоційованого розчину для розплавів Fe–Ni–Zr, Fe–Ni–Hf, Fe–Ti–Zr. База даних параметрів моделей термодинамічних функцій змішування розплавів Fe–Cu–Ni–Ti–Zr(Hf). Результати моделювання термодинамічних властивостей розплавів, склади ассоційованого розчину та прогнозовані концентраційні області отримання аморфних сплавів три-, чотири- та п'ятикомпонентних розплавів Fe–Cu–Ni–Ti–Zr(Hf). Термодинамічний опис системи Fe–Ni–Ti та розраховані ізотермічні перетини, політермічні перерізи, ліквідусу та солідусу діаграми стану системи, координати нонваріантних перетворень, реакційна схема.

Назва НТП англійською: Partial and integral enthalpy of mixing of the Fe–Ni–Zr, Fe–Ni–Hf and Fe–Ti–Zr melts. Parameters of the mathematical models and associate solution models for the Fe–Ni–Zr, Fe–Ni–Hf and Fe–Ti–Zr liquid alloys. The results of modeling the thermodynamic properties of melts, the compositions of the associated solution and the predicted concentration regions of amorphous alloys of three-, four- and five-component Fe–Cu–Ni–Ti–Zr(Hf) melts. Thermodynamic assessment of the Fe–Ni–Ti system and calculated isothermal and polythermal cross sections, liquidus and solidus projections of the phase diagram of the system, coordinates of non-variant phase transformations, reaction scheme.

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: Експериментально визначено парціальні та інтегральні ентальпії змішування компонентів розплавів систем Fe–Ni–Zr, Fe–Ni–Hf та Fe–Ti–Zr, для яких створено математичні моделі та моделі асоційованого розчину. Створено базу даних параметрів моделей термодинамічних функцій змішування розплавів Fe–Cu–Ni–Ti–Zr(Hf). Виконано моделювання термодинамічних властивостей розплавів, розраховано склад асоційованого розчину та спрогнозовані концентраційні області отримання швидкозагартованих аморфних сплавів чотири- та п'ятикомпонентних розплавів Fe–Cu–Ni–Ti–Zr(Hf). В рамках CALPHAD-методу розроблено новий термодинамічний опис системи Fe–Ni–Ti, та розраховано ізотермічні перетини, політермічні перерізи, проекції поверхонь ліквідусу та солідусу діаграми стану системи, координати нонваріантних перетворень, реакційна схема.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту, Створення нових аморфних та високоентропійних сплавів та технологій їх отримання.

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Споживачі продукції: Вища освіта, металургійні та машинобудівні підприємства.

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. Agraval, P. Thermodynamic Assessment of the Co-Zr System / P. Agraval, L. Dreval, M. Turchanin, T. Velikanova // J. Phase Equilib. Diffus. – 2020. – Vol.41, No.4. – P.491–499. – DOI: https://doi.org/10.1007/s11669-020-00805-5

2. Turchanin, M. Calorimetric Investigation of the Mixing Enthalpy of Liquid Hf-Ni-Ti Alloys and Thermodynamic Properties and Chemical Ordering in Quaternary Liquid Cu-Hf-Ni-Ti Alloys / M. Turchanin, P. Agraval, L. Dreval, A. Vodopyanova // J. Phase Equilib. Diffus. – 2020. – Vol.41, No.4. – P.469-490. – DOI: https://doi.org/10.1007/s11669-020-00806-4

3. Zeng, Y. Thermodynamic Assessment of the Mg–Ni–Si System / L. Dreval, O. Dovbenko, ..., P. Agraval, M. Turchanin // Powder Metallurgy and Metal Ceramics – 2020. – Vol: □ 59, No. □ 3-4. – P.□ 209-223

4. Підченко, А. С. Взаємодія компонентів в рідких сплавах і діаграма стану системи Fe–Ni / А. С. Підченко, П.Г. Агравал, М.А. Турчанін // Доповідь на XLII Науково-технічній конференції науково-педагогічних працівників, докторантів, аспірантів, магістрантів і студентів ДДМА, 23-27 листопада 2020 р. – Краматорськ: ДДМА, 2020.

5. Водоп'янова, Г. О. Взаємодія компонентів в рідких сплавах і діаграми стану двокомпонентних систем Fe–Hf і Ni–Hf / Г. О. Водоп'янова, П.Г. Агравал, М.А. Турчанін // Доповідь на XLII Науково-технічній конференції науково-педагогічних працівників, докторантів, аспірантів, магістрантів і студентів ДДМА, 23-27 листопада 2020 р. – Краматорськ: ДДМА, 2020.

6. Агравал, П. Г. Взаємодія компонентів в рідких сплавах аморфоутворюючої системи Fe–Ni–Hf / П.Г. Агравал, М.А. Турчанін, Г. О. Водоп'янова // Доповідь на XLII Науково-технічній конференції науково-педагогічних працівників, докторантів, аспірантів, магістрантів і студентів ДДМА, 23-27 листопада 2020 р. – Краматорськ: ДДМА, 2020.

7. Їнпінг, Чен, Thermodynamic assessment of the Mg–Ni–Si system (на англ.) / Ї. Чен, Л.О. Древаль, О.І. Довбенко, ..., П.Г. Агравал, М.А. Турчанін // Порошковая металлургия – 2020. – № 3/4. – С. 120-137.

8. Агравал, П. Г. Температурно-концентраційна залежність термодинамічних функцій змішування розплавів Co–Cr–Cu–Fe–Ni / П. Г. Агравал, Л. О. Древаль, М. А. Турчанін, Г. О. Водоп’янова // Порошковая металлургия – 2020. – № 11/12. – С. 113-126.

X. Заключні відомості

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

Перелік осіб-виконавців

Агравал Павло Гянович
(к. х. н.)

Водопьянова Ганна Олександрівна
(к. х. н.)

Древаль Лія Олександрівна
(к. х. н.)

Корсун Владислав Анатолійович

Підченко Аліна Сергіївна

Тимошенко Оксана Анатоліївна
(к. х. н.)

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

