Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U105813

Державний реєстраційний номер: 0120U104793

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-09-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Експериментальне визначення ентальпії змішування розплавів Co–Ti–Zr та Co–Cu–Hf, моделювання термодинамічних властивостей розплавів Co–Ni–Ti та Co–Ti–Zr, термодинамічний опис системи Co–Ti та підготовка вихідних даних для термодинамічного опису системи Co–Hf.

Початок етапу: 05.2021

Закінчення етапу: 08.2021

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): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622

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): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 366.998

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Термодинаміка розплавів і фазові перетворення в багатокомпонентних системах перехідних металів як наукова основа розробки аморфних сплавів.

Назва роботи англійською:

Thermodynamics of melts and phase transformations in multicomponent systems of transition metals as a scientific basis for the development of amorphous alloys.

Реферат українською:

Об'єкти досліджень: розплави системи Co–Ni–Ti, Co–Ti–Zr та Co–Cu–Hf, термодинамічні властивості фаз та фазові рівноваги систем Co–Ti та Co–Hf. Цілі: визначити експериментально та описати концентраційну залежність ентальпії змішування розплавів Co–Ti–Zr та Co–Cu–Hf в рамках математичних моделей; описати температурно-концентраційну залежність термодинамічних властивостей розплавів систем Co–Ni–Ti та Co–Ti–Zr в рамках моделі асоційованого розчину; розробити термодинамічний опис системи Co–Ti та розраховати її діаграму стану; підготувати набір даних для проведення термодинамічного опису системи Co–Hf в рамках CALPHAD-методу. Методи досліджень: високотемпературна ізоперибolічна калориметрія, математичні моделі термодинамічних властивостей розплавів, модель асоційованого розчину, CALPHAD-метод. Результати: експериментально досліджено ентальпії змішування, визначено параметри поліноміальних моделей, що описують парціальні ентальпії змішування, та визначено параметри моделі Редліха-Кістера-Муджіану, що описують інтегральну ентальпію змішування в розплавах Co–Ti–Zr та Co–Cu–Hf при 1873 K; визначено параметри моделі асоційованого розчину та встановлено температурно-концентраційну залежність термодинамічних властивостей розплавів Co–Ni–Ti та Co–Ti–Zr; розроблено новий термодинамічний опис системи Co–Ti та розраховано її діаграму стану; підготовлено набір несуперечливих даних з термодинамічних властивостей розплавів, інтерметалічних сполук та фазових рівноваг для термодинамічного опису системи Co–Hf в рамках CALPHAD-методу. 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 Co–Ni–Ti, Co–Ti–Zr and Co–Cu–Hf systems, thermodynamic properties of phases and phase equilibria of the Co–Ti and Co–Hf systems. Objectives: experimental study of the enthalpies of mixing of liquid Co–Ti–Zr and Co–Cu–Hf alloys; description of the concentration dependence of the enthalpy of mixing of Co–Ti–Zr and Co–Cu–Hf melts within mathematical models; to describe the temperature-concentration dependence of thermodynamic properties of melts of Co–Ni–Ti and Co–Ti–Zr systems within the framework of the associated solution model; development of a thermodynamic assessment of the Co–Ti system and calculate its phase diagram; preparation a dataset for assessment of Co–Hf system within the framework of CALPHAD-method. Research methods: high-temperature isoperibolic calorimetry, mathematical models of thermodynamic properties of melts; associated solution model, CALPHAD-method. Results: the enthalpies of mixing were experimentally investigated, the parameters of polynomial models describing partial enthalpies of mixing were determined, and the parameters of the Redlich-Kister-Muggianu model describing the integral enthalpy of mixing in the Co–Ti–Zr and Co–Cu–Hf melts at 1873 K were determined; the parameters of the associated solution model are determined and the temperature-concentration dependence of the thermodynamic properties of Co–Ni–Ti and Co–Ti–Zr melts is established; a new thermodynamic assessment of the Co–Ti system was developed and its phase diagram was calculated; a set of consistent data on the thermodynamic properties of melts, intermetallic compounds and phase equilibria was prepared for the thermodynamic assessment of the Co–Hf system within the CALPHAD method. 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; 541.341/.344; 544.34 , 536.66:544.33:546.56’73’74’82’83

Коди тематичних рубрик: 31.15.25

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 систем Co–Ti–Zr та Co–Cu–Hf. Параметри поліноміальних моделей для ентальпій змішування рідких сплавів Co–Ti–Zr та Co–Cu–Hf. Параметри моделей асоційованого розчину та результати розрахунків термодинамічних властивостей розплавів систем Co–Ni–Ti та Co–Ti–Zr в інтервалі температур 800–1873 K. Термодинамічний опис системи Co–Ti та розрахована діаграма стану системи, координати нонваріантних фазових перетворень та термодинамічні властивості фаз системи. Набір несуперечливих даних про термодинамічні властивості фаз і фазові рівноваги системи Co–Hf для проведення термодинамічного опису системи в рамках CALPHAD-методу.

Назва НТП англійською: Partial and integral enthalpies of mixing of the Co–Ti–Zr and Co–Cu–Hf melts. Parameters of the polynomial models for the enthalpy of mixing of liquid Co–Ti–Zr and Co–Cu–Hf alloys. Parameters of associated solution models and results of calculations of thermodynamic properties of melts of Co–Ni–Ti and Co–Ti–Zr systems in the temperature range 800–1873 K. Thermodynamic assessment of the Co–Ti system and calculated phase diagram, coordinates of nonvariant phase transformations and thermodynamic properties of the system phases. A set of consistent data on the thermodynamic properties of phases and phase equilibria of the Co–Hf system for assessment of the system within the framework of the CALPHAD method.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Матеріали

Галузь застосування: Дослідження і розробки в галузі природничих та технічних наук

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Експериментально визначено парціальні ентальпії змішування Ti, Zr, Hf. За допомогою поліноміальних моделей описано концентраційну залежність парціальних та інтегральної ентальпій змішування компонентів розплавів систем Co–Ti–Zr та Co–Cu–Hf. Отримано значення коефіцієнтів відповідних поліноміальних моделей та моделей Редліха-Кістера-Муджіану. Визначено параметри моделей асоційованого розчину та результати розрахунків термодинамічних властивостей розплавів систем Co–Ni–Ti та Co–Ti–Zr в інтервалі температур 800–1873 K. Розроблено новий термодинамічний опис системи Co–Ti та розраховані її діаграма стану, координати нонваріантних фазових перетворень та термодинамічні властивості фаз системи. Підготовлено несуперечливий набір даних для термодинамічного опису системи Co–Hf в рамках CALPHAD-методу.

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: 10.2022

Закінчення етапу: 12.2022

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 обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

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.

X. Заключні відомості

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

Перелік осіб-виконавців

Агравал Павло Гянович
(к. х. н., 02.00.04)

Водоп'янова Ганна 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