Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U103074

Державний реєстраційний номер: 0120U100475

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-02-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розробка математичних моделей отримання багатошарових покриттів із заданими властивостями

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): Сумський державний університет

Код за ЄДРПОУ: 05408289

Місцезнаходження: вул. Римського-Корсакова 2, м. Суми, Сумський р-н., Сумська обл., 40007, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380542334058

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: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 508.944

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Мультишарові захисні покриття з покращеними фізико-механічними властивостями на основі нітридів високоентропійних сплавів

Назва роботи англійською:

Improved physical and mechanical properties multilayer protective coatings based on high-entropy alloy nitrides

Реферат українською:

Об'єкт дослідження - Фазовий та елементний склад, мікроструктура, теплові та механічні властивості багатошарових покриттів на основі нітридів високоентропійних сплавів. Мета роботи - Встановлення взаємозв'язку між елементним, фазовим і напружено-деформованим станом та термічною стабільністю, механічними і трибологічними властивостями наноструктурних захисних мультишарових покриттів на основі нітридів високоентропійних сплавів, та впливу на них технологічних параметрів осадження, а саме тиску робочого газу та потенціалу зсуву підкладки. Дослідження включають в себе кілька теоретичних методів а також комп'ютерне моделювання, а саме: першопринципний розрахунок молекулярної динаміки за теорією функціоналу густини (DFT), розрахунок фазових діаграм (CALPHAD), Дата майнінг (Data Mining), алгоритми машинного навчання (Linear regression, Random forest regression, Gradient boosting regression). Основним результатом, є прогнозування та визначення структури та складу нітридів високоентропійних сплавів та їх впливу на формування фізико-механічних та теплових властивостей плівок, що синтезуються. Наукова новизна результатів базується на створенні нових моделей прогнозування структуроутворення та характеристик невідомих високоентропійних сплавів та їх сполук, моделюванні фізико-механічних властивостей та фазової стабільності найбільш ефективних елементних комбінацій. Отримані у роботі нові наукові результати можуть бути використані у промисловості для відбору та оптимізації якісних захисних покриттів для металевих та керамічних поверхонь що перебувають у жорстких умовах (ерозія, знос, різання, термообробка, хімічна обробка, тощо). У процесі виконання поставлених завдань була розроблена методологія аналізу і передбачення фізико-механічних та теплових властивостей ВЕСів за допомогою Data Mining та алгоритмів машинного навчання, що дає основу для подальшого впровадження у виробництво систем обробки масивів даних, особливо тих що стосуються нових матеріалів та їх властивостей.

Реферат англійською:

Object of research - Phase and elemental composition, microstructure, thermal and mechanical properties of multilayer coatings based on nitrides of high-entropy alloys. Purpose - To establish the relationship between elemental, phase and stress-strain state and thermal stability, mechanical and tribological properties of nanostructured protective multilayer coatings based on nitrides of high-entropy alloys, and the influence of technological parameters of deposition, namely working gas pressure and gas pressure substrates. The research includes several theoretical methods as well as computer modeling, namely: basic calculation of molecular dynamics according to the theory of density functional (DFT), calculation of phase diagrams (CALPHAD), Date Mining, Data Mining algorithms, Linear regression, Random forest regression, Gradient boosting regression). The main result is the prediction and determination of the structure and composition of nitrides of high-entropy alloys and their influence on the formation of physical-mechanical and thermal properties of the synthesized films. The scientific novelty of the results is based on the creation of new models for predicting the structure and characteristics of unknown high-entropy alloys and their compounds, modeling of physical and mechanical properties and phase stability of the most effective element combinations. The new scientific results obtained in this work can be used in industry to select and optimize high-quality protective coatings for metal and ceramic surfaces in harsh conditions (erosion, wear, cutting, heat treatment, chemical treatment, etc.). In the process of performing the tasks the methodology of analysis and prediction of physical-mechanical and thermal properties of

wind farms with the help of Data Mining and machine learning algorithms was developed, which provides a basis for further implementation of data arrays processing systems, especially those related to new materials and their properties.

Індекс УДК: 539.3, 539.231, 539.32, 548.735, 539.533

Коди тематичних рубрик: 30.19

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Рогоз Владислав Миколайович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Математичні моделі отримання багатошарових покриттів із заданими властивостями

Назва НТП англійською: Mathematical models of obtaining multilayer coatings with given properties

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.1.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Створені моделі за алгоритмами машинного навчання для розрахунку та прогнозування структури та властивостей покриттів. Створено базу даних прогнозованих термічних та фізико-механічних властивостей майбутніх покриттів на базі високоентропійних сплавів та виявлено комбінації з найбільшою перспективою у подальшому використанні. Змодельовано фазову та термостабільність заздалегідь прогнозованого високоентропійного сплаву TiVNbMoW в залежності від складу та температури. Змодельовано фазову та термостабільність заздалегідь прогнозованого високоентропійного сплаву TiVNbMoW в залежності від складу та температури.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення продуктивності праці

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Споживачі продукції: ВНЗ України

Перспективні ринки: України

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

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Васильєв Анатолій Васильович
к. т. н.

Перелік осіб-виконавців

Багдасарян Артем Анатолійович
(к. ф.-м. н.)

Буранич Володимир Володимирович

Владзієвська Поліна Антонівна

Загорулько Анастасія Андріївна

Кириченко Олександр Олександрович

Погорєлий Марк Андрійович

Постольний Богдан Олександрович
(к. ф.-м. н.)

Смирнова Катерина Василівна

Черненко Віктор Валерійович

Відповідальний за підготовку облікових документів Мельник Н.В.

Телефон +38 (054) 268-76-82

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

