



**АНОТОВАНИЙ ЗВІТ**  
**про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проєкту**  
**із виконання наукових досліджень і розробок**  
«Регулювання розподілу атомів задля функціоналізації матеріалів на основі гібридної фази Fe<sub>16</sub>N<sub>2</sub>-мартенситу, альтернативних постійним магнітам з рідкісноземельних інтерметалідів або пермендюру»

**Назва конкурсу:** «Підтримка досліджень провідних та молодих вчених»  
**Реєстраційний номер Проєкту:** 2020.02/0191

**Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок**  
«Регулювання розподілу атомів задля функціоналізації матеріалів на основі гібридної фази Fe<sub>16</sub>N<sub>2</sub>-мартенситу, альтернативних постійним магнітам з рідкісноземельних інтерметалідів або пермендюру» (реєстраційний номер 2020.02/0191)

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу «Підтримка досліджень провідних та молодих вчених» (назва конкурсу) протокол від «26» жовтня 2020 року № 30

## **1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ**

Тривалість виконання Проєкту  
Початок — 27.10.2020 р. (дата укладання договору про виконання наукових досліджень і розробок);  
Закінчення — грудень 2021 року.

Загальна вартість Проєкту: 1060000 (один мільйон шістдесят тисяч) грн.

Вартість Проєкту по роках:  
1-й рік — 260000 (двісті шістдесят тисяч) грн.  
2-й рік — 800000 (вісімсот тисяч) грн.

## **2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ**

До виконання Проєкту залучено 4 виконавці, з них:  
доктори наук — 3;  
кандидати наук — 1.

## **3. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ГРАНТООТРИМУВАЧА ТА ОРГАНІЗАЦІЮ(Ї) СУБВИКОНАВЦЯ(ІВ) ПРОЄКТУ**

Грантоотримувач: Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, бульвар Академіка

Вернадського, 36, 03142 Київ, Україна.  
Субвиконавця не залучено.

#### **4. ОПИС ПРОЄКТУ**

##### **4.1. Мета Проєкту (до 200 знаків)**

Метою проєкту є стабілізація будови та керування властивостями мартенситної фази  $\alpha''$ -Fe<sub>16</sub>N<sub>2</sub> через зміну зовнішніх термодинамічних параметрів задля оптимізації її властивостей та функціоналізації.

##### **4.2. Основні завдання Проєкту (до 400 знаків)**

Побудувати статистично-термодинамічну модель гібридного твердого розчину втілення–заміщення, в якому атоми неметалу, втілені в октаедричні міжвузля, з підвищенням температури можуть частково переходити у вузли металевої ОЦК(Т)-гратниці з вакансіями. Для  $\alpha''$ -Fe<sub>16</sub>N<sub>2</sub>-фази Fe–N-мартенситу з атомами N у міжвузлях і на вузлах ОЦТ-заліза дослідити її термодинамічні, структурні й магнітні характеристики.

##### **4.3. Детальний зміст Проєкту:**

###### – Сучасний стан проблеми (до 400 знаків)

Мартенситна фаза  $\alpha''$ -Fe<sub>16</sub>N<sub>2</sub> з унікальними та перспективними магнітними властивостями є альтернативою рідкісноземельним інтерметалідам і пермендюру на світовому ринку виробництва постійних магнітів. Втім повне розуміння як зі зміною зовнішніх термодинамічних параметрів можна регулювати її будову та властивості наразі відсутнє. Цю теоретичну прогалину слід подолати побудовою відповідної моделі.

###### – Новизна Проєкту (до 400 знаків)

Вперше пропонується проєкт, спрямований на з'ясування структурних, термодинамічних і магнітних особливостей гібридного твердого розчину з урахуванням далекосяжних взаємодій між атомами та вакансіями (із магнітним і деформаційно-індукованим внесками, окрім «хімічного») у всіх координаційних сферах кристалічної гратниці  $\alpha''$ -Fe<sub>16</sub>N<sub>2</sub> — стратегічно важливого об'єкта дослідження.

###### – Методологія дослідження (до 400 знаків)

Методологія статичних концентраційних хвиль — для аналізу статистичної термодинаміки та фізичної кінетики атомового порядку (теоретичного опису просторового розподілу точкових дефектів по вузлах і/чи міжвузлях кристалічної гратниці твердого розчину). Модельний Гамільтоніан у наближенні самоузгодженого (середнього) поля — для аналізу магнетизму (обмінної взаємодії за Гайзенбергом).

#### **5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ (до 2 сторінок) в поточному році / в рамках реалізації Проєкту, зокрема:**

##### **5.1. Опис наукових або науково-технічних результатів, отриманих в рамках виконання Проєкту (із зазначенням їх якісних та кількісних (технічних) характеристик)**

Оглянуто та проаналізовано літературні (експериментальні та теоретичні) дані стосовно тетрагонального мартенситу з легувальними елементами втілення–заміщення та вакансіями. Особливу увагу приділено вивченню мартенситної фази типу  $\alpha''$ -Fe<sub>16</sub>N<sub>2</sub> з унікальними та перспективними магнітними властивостями як альтернативи рідкісноземельним інтерметалідам і пермендюру на світовому ринку виробництва постійних магнітів. Охоплено період від часу відкриття її до нинішнього стану досліджень. Розвинуто статистично-термодинамічний модель «гібридного» твердого розчину втілення–заміщення на основі кристалічної ОЦТ-гратниці, де легувальні неметалеві компоненти (домішкові атоми) можуть займати як міжвузля, так і вакантні вузли ОЦК(Т)-гратниці металу. Враховано дискретну (атомарно-кристалічну) будову гратниці, анізотропію пружності, а також «блокувальні» та деформаційні (у тому числі «розмірні») ефекти у міжатомових взаємодіях. Модель адаптовано

до максимально впорядкованої за типом  $\alpha''$ -Fe<sub>16</sub>N<sub>2</sub> нестехіометричної фази мартенситу Fe–N з атомами Нітрогену в октаедричних міжвузлях і на вузлах ОЦТ-заліза вище його температури Кюрі. Наголошено на важливості адекватного набору (залежних від температури та концентрації) наявних (у літературі) мікроскопічних енергетичних параметрів взаємодій атомів і вакансій. З'ясовано особливості змінення, а саме, немонотонного зменшення, за підвищення температури відносної концентрації атомів N в октаедричних міжвузлях ОЦТ-Fe, а тому й (корельованого з цією концентрацією) ступеня його тетрагональності.

Детально наукові результати виконання проєкту (у вигляді нових знань) висвітлено у науковому звіті та у статті “Martensitic  $\alpha''$ -Fe<sub>16</sub>N<sub>2</sub>-type phase of non-stoichiometric composition: current status of research and microscopic statistical-thermodynamic model” («Мартенситна фаза типу  $\alpha''$ -Fe<sub>16</sub>N<sub>2</sub> нестехіометричного складу: нинішній стан досліджень і мікроскопічний статистично-термодинамічний модель»), авторами якої є науковий керівник Проєкту та його виконавці, у журналі *Progress in Physics of Metals (Успіхи фізики металів)*, Vol. 21, No. 4, P. 580–619 (2020), <https://doi.org/10.15407/ufm.21.04.580>, який індексується (зокрема й) у Scopus (індекс цитування CiteScore — 1,8; кватиль — Q2) і Web of Science Core Collection (ESCI), а у затверженому Міністерством освіти і науки України переліку наукових фахових видань України відноситься до категорії «А».

## **5.2. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з існуючими аналогами**

Отримані наукові результати не мають аналогів в Україні та відповідають світовому науковому рівню. Головними перевагами їх у порівнянні зі світовими є адекватність всеосяжного врахування внесків у взаємочин дефектів структури у ентропію на атомарному рівні опису системи, короткочасний (фактично півтора місяця) термін реалізації наукових задумів та ідей, набагато дешевші за світові витрати на фінансування Проєкту.

## **5.3. Практична цінність отриманих результатів реалізації Проєкту для економіки та суспільства (стосується проєктів, що передбачають проведення прикладних наукових досліджень і науково-технічних розробок)**

Оскільки наукові дослідження в рамках проєкту мають фундаментальний характер, то результатом слугує одержання нових знань.

## **5.4. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.**

Теоретичні результати виконання фундаментального Проєкту висвітлено у науковій публікації та звіті. Вони сприяють розумінню фізичної природи явищ, що відбуваються у мартенситі типу  $\alpha''$ -Fe<sub>16</sub>N<sub>2</sub>.

Примітка: Анотований звіт не повинен містити відомостей, заборонених до відкритого опублікування

### **Науковий керівник Проєкту**

провідний науковий співробітник

відділу теорії металічного стану

Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України,

д.ф.-м.н., с.н.с.

Радченко Тарас Михайлович

  
(підпис)