

ЗАТВЕРДЖУЮ  
В.о. ректора Донбаської державної  
машинобудівної академії  
(посада)

Ковальов Віктор Дмитрович  
ПБ

(підпис)  
М.П.



**АНОТОВАНИЙ ЗВІТ**  
**про виконану роботу у 2020 році в рамках реалізації проєкту**  
**із виконання наукових досліджень і розробок**  
Термодинаміка розплавів і фазові перетворення в багатокомпонентних системах перехідних  
металів як наукова основа розробки аморфних сплавів  
(назва Проєкту)

Назва конкурсу: Підтримка досліджень провідних та молодих учених  
Реєстраційний номер Проєкту: 2020.02/0268

Підстава для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок реєстраційний номер 2020.02/0268 та назва Проєкту "Термодинаміка розплавів і фазові перетворення в багатокомпонентних системах перехідних металів як наукова основа розробки аморфних сплавів"

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу Підтримка досліджень провідних та молодих учених протокол від «16-17» вересня 2020 року № 21

## 1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Тривалість виконання Проєкту  
Початок – 8 жовтня 2020 року;  
Закінчення – грудень 2022 року.

Загальна вартість Проєкту, грн.  
1220000

Вартість Проєкту по роках, грн.:

1-й рік 148000

2-й рік 551000

3-й рік 521000

## 2. ІНФОРМАЦІЯ ПРО ВИКОНАВЦІВ ПРОЄКТУ

до виконання Проєкту буде залучено 6 виконавців, з них:

доктори наук 1 ;

кандидати наук 3 ;

інші працівники 2 .

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

#### **Грантоотримувач**

Донбаська державна машинобудівна академія  
Організаційно-правова форма підприємства/установи/організації  
Державна організація (установа, заклад, підприємство)  
Підпорядкованість підприємства/установи/організації  
Міністерство освіти і науки України  
Код ЄДРПОУ 02070789  
Код(и) КВЕД 85.42, 85.59, 72.19, 72.20  
Стратегічні напрями наукової діяльності  
Математичні та природничі науки, Технічні науки, Суспільні науки  
ПІБ керівника підприємства/установи/організації  
Ковальов Віктор Дмитрович  
Юридична адреса підприємства/установи/організації  
84313, м. Краматорськ, Донецька обл., вул. Академічна, 72  
Поштова адреса  
84313, м. Краматорськ, Донецька обл., вул. Академічна, 72  
Фактична адреса  
84313, м. Краматорськ, Донецька обл., вул. Академічна, 72  
Телефон +38 0626 41 68 09  
Адреса електронної пошти [dgma@dgma.donetsk.ua](mailto:dgma@dgma.donetsk.ua)  
Посилання на веб сторінку підприємства/установи/організації <http://www.dgma.donetsk.ua/>

Проєктом не передбачено залучення субвиконавців.

### **4. ОПИС ПРОЄКТУ**

#### **4.1. Мета Проєкту**

На прикладі модельних систем Co–Cu–Ni–Ti–Zr і Co–Cu–Ni–Ti встановити фундаментальні фізико-хімічні фактори, що визначають здатність багатокомпонентних розплавів перехідних металів до утворення аморфних сплавів в умовах нерівноважного синтезу.

#### **4.2. Основні завдання Проєкту**

- експериментально дослідити ентальпії змішування розплавів;
- розробити базу даних для розплавів модельних систем;
- визначити температурно-концентраційну залежність термодинамічних функцій змішування розплавів;
- розрахувати рівноважні та метастабільні фазові перетворення за участю переохолоджених розплавів і систематизувати фізико-хімічні фактори, що визначають їх здатність до аморфізації;
- розробити методики та прогнозувати концентраційні області аморфізації розплавів модельних систем.

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

- Сучасний стан проблеми

Коло відомих систем і складів для розробки нових аморфних матеріалів залишається дуже обмеженим через відсутність систематичного теоретичного дослідження явища. При розгляді питання застосовуються спрощені термодинамічні міркування, що унеможливує точний кількісний опис феномену аморфізації та факторів, що на нього впливають. Перспективним є залучення моделі асоційованого розчину для опису термодинаміки розплавів і CALPHAD-методу для моделювання фазових перетворень за участю розплавів.

- Новизна Проєкту

Принциповим моментом наукової новизни проєкту є запропонований комплексний термодинамічний підхід, який одночасно містить в собі методи експериментальних досліджень, моделювання температурно-концентраційної залежності термодинамічних властивостей розплавів і розрахункові методи теорії фазових рівноваг. Такий підхід досі не був в повній мірі реалізований ні в одному науковому центрі в світі. Більшість наукових результатів у ході виконання проєкту будуть одержані вперше.

- Методологія дослідження

Методологічною основою досліджень стане термодинамічний підхід. Основним методом експериментального дослідження термодинамічних властивостей розплавів стане високотемпературна калориметрія. Теоретичні дослідження будуть проведені із залученням математичного і феноменологічного (модель асоційованого розчину) моделювання. Інформація про термодинамічні властивості фаз з даними про фазові рівноваги і метастабільні перетворення буде узагальнена в рамках CALPHAD-методу.

## **5. ОТРИМАНІ НАУКОВІ АБО НАУКОВО-ТЕХНІЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ 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)**

Згідно із завданнями на етап ЕВП N1 проведені калориметричні експерименти по дослідженню ентальпії змішування розплавів Co–Ni–Ti при 1873 K, в результаті яких вперше отримано набір експериментальних даних з парціальної ентальпії змішування титану. Досліди з вивчення парціальної ентальпії змішування титану  $\Delta_m \bar{H}_{Ti}$  проведені вздовж променевих перерізів  $x_{Co}/x_{Ni} = 3/1$ ,  $x_{Co}/x_{Ni} = 1/1$  та  $x_{Co}/x_{Ni} = 1/3$ . Встановлено, що для  $\Delta_m \bar{H}_{Ti}$  характерні від’ємні значення, найменше із яких досягається в перерізі  $x_{Co}/x_{Ni} = 1/3$  при нескінченному розведенні і становить  $-209 \pm 19$  кДж/моль. Експериментальні дані з  $\Delta_m \bar{H}_{Ti}$  оброблені статистичними методами, в результаті чого отримані коефіцієнти поліноміальних моделей, що описують їх концентраційну залежність, та розраховано значення інтегральної ентальпії змішування  $\Delta_m H$  вздовж досліджених променевих перерізів. Функція  $\Delta_m H$  для кожного з перерізів проходить через мінімум, найменше значення цієї функції складає  $-42 \pm 2$  кДж/моль при  $x_{Ti} = 0,40$  (переріз  $x_{Co}/x_{Ni} = 1/3$ ). В досліджених перерізах функція  $\Delta_m H$  займає проміжне положення щодо відповідних інтегральних властивостей в граничних двокомпонентних системах Co–Ti та Ni–Ti, що свідчить про визначальну роль парних взаємодій CoTi і NiTi в енергетиці утворення розплавів Co–Ni–Ti. Функція  $\Delta_m H$  розплавів Co–Ni–Ti при 1873 K на всьому концентраційному трикутнику описана в рамках моделі Редліха-Кістера-Муджіану. Мінімальне значення  $\Delta_m H$  досягається в концентраційному трикутнику і становить  $-41,3$  кДж/моль для сплаву  $Co_{0,10}Ni_{0,50}Ti_{0,40}$ . Всі ці результати отримані вперше.

Встановлені експериментально від’ємні значення ентальпії змішування розплавів системи Co–Ni–Ti свідчать про відповідні від’ємні відхилення надлишкових термодинамічних функцій змішування розплавів від закону Рауля. Саме такий характер термодинамічних функцій змішування є властивим для розплавів аморфоутворюючих систем. Одержані експериментальні результати складають підґрунтя для розробки моделі температурно-концентраційної залежності надлишкових термодинамічних функцій змішування з подальшим використанням в розрахунках фазових перетворень за участю розплавів.

Проведено огляд літературних джерел про термодинамічні властивості фаз та фазові рівноваги системи Co–Ti. Встановлено, що на поточний момент експериментально визначено термодинамічні властивості рідкої фази і інтерметалічних сполук  $Co_3Ti$ , C36, CoTi. Для термодинамічних властивостей рідких сплавів Co–Ti характерні від’ємні відхилення від ідеальності. Експериментальні дані по фазовим рівновагам дозволяють визначити області стабільного існування рідкої фази, граничних твердих розчинів і інтерметалічних сполук  $Co_3Ti$ , C15, C36, CoTi та  $CoTi_2$ . Інтерметалічні фази  $Co_3Ti$ , C15, C36 і CoTi мають області гомогенності.

За результатами аналізу літературних даних визначено набір достовірних несуперечливих даних про термодинамічні властивості фаз та фазові рівноваги для подальшого термодинамічного опису системи Co–Ti в рамках CALPHAD-методу. Літературні дані з термодинамічних властивостей рідких сплавів, інтерметалічних сполук та фазових рівноваг у системі Co–Ti представлені у вигляді таблиць і рисунків та надані в формі, зручній для проведення термодинамічного опису системи.

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

Експериментальні дані про ентальпії змішування розплавів потрійної системи Co–Ni–Ti були одержані вперше і не мають вітчизняних та світових аналогів. Дослідження були проведені з використанням однієї з найкращих у світі калориметричної установки та експериментальної методики. Ці дані доповнюють відсутню інформацію про термодинамічні властивості розплавів трикомпонентних систем гомологічного ряду Co–Ni–IVB–Me.

Моделі концентраційної залежності ентальпії змішування розплавів Co–Ni–Ti на всьому концентраційному трикутнику отримані в рамках єдиного підходу і узагальнюють дані про термодинамічні властивості двокомпонентних систем Co–Ti та Ni–Ti.

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

Одержані експериментальні дані з ентальпії змішування розплавів Co–Ni–Ti доповнюють існуючу інформацію про термодинамічні властивості багатокомпонентних сплавів аморфоутворюючих систем. З точки зору фундаментальної науки отримані дані доповнюють інформацію про характер зміни термодинамічних функцій змішування в гомологічному ряді систем Co–Ni–IVB–Me. Одержані експериментальні дані з ентальпії змішування розплавів Co–Ni–Ti в подальшому будуть використані для моделювання температурно-концентраційної залежності термодинамічних властивостей розплавів Co–Ni–Ti, які, в свою чергу, будуть використані для розрахунку стабільних та метастабільних фазових перетворень в рамках CALPHAD-методу і для прикладних розрахунків з прогнозування областей аморфізації розплавів.

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

Отримані в роботі наукові результати можуть бути використані широким колом фахівців в галузях хімічного та фізичного матеріалознавства, фізичної хімії, тонкого металургійного синтезу, теорії металургійних та ливарних процесів. Отримані результати будуть сприяти розробці новітніх конкурентоспроможних технологій спрямованого одержання металевих матеріалів із наперед заданим комплексом властивостей і запровадження технологій одержання продукції високотехнологічного металургійного синтезу. Такі матеріали можуть знайти своє застосування в нових виробках авіаційної та ракетно-космічної промисловості, розробці нових боєприпасів.

Одержані результати будуть корисним у вищих навчальних закладах при викладанні дисциплін за планом бакалаврів, магістрів та аспірантів за фахом «Фізична хімія», «Фізичне матеріалознавство», «Металургія» при викладанні дисциплін «Фізико-хімічні основи синтезу сплавів» (бакалаври), спеціальних дисциплін за темою наукових досліджень (магістри) і дисциплін «Експериментальні дослідження і моделювання термодинамічних властивостей фаз» та «Експериментальні дослідження і моделювання фазових рівноваг» (аспіранти).

#### **Науковий керівник Проєкту**

проректор з наукової роботи, управління розвитком та міжнародних зв'язків

(посада)

: Турчанін М.А.

ІІБ

(підпис)