



АНОТОВАНИЙ ЗВІТ
про виконану роботу в рамках реалізації проєкту
із виконання наукових досліджень і розробок
«Регулювання розподілу атомів задля функціоналізації матеріалів на основі гібридної фази Fe₁₆N₂-мартенситу, альтернативних постійним магнітам з рідкісноземельних інтерметалідів або пермендьюру»

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

Підстави для реалізації Проєкту з виконання наукових досліджень і розробок
«Регулювання розподілу атомів задля функціоналізації матеріалів на основі гібридної фази Fe₁₆N₂-мартенситу, альтернативних постійним магнітам з рідкісноземельних інтерметалідів або пермендьюру» (реєстраційний номер 2020.02/0191)

Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України щодо визначення переможця конкурсу, протокол від «16–17» вересня 2020 року № 21
Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України про схвалення звіту та продовження надання грантової підтримки проєкту від «26» грудня 2020 року № 43

1. ЗАГАЛЬНА ІНФОРМАЦІЯ ПРО ПРОЄКТ

Тривалість виконання Проєкту
Початок: 27.10.2020 року
Завершення: 15.12.2021 року

Загальна вартість Проєкту:
993310,00 грн. (дев'ятсот дев'яносто три тис. триста десять грн.)

Вартість Проєкту по роках:
1-й рік: 260000,00 грн. (двісті шістьдесят тис. грн.)
2-й рік: 733310,00 грн. (сімсот тридцять три тис. триста десять грн.)
3-й рік: 0 (нуль) 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 СУБВИКОНАВЦЯ 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 $\alpha''\text{-Fe}_{16}\text{N}_2$ через зміну зовнішніх термодинамічних параметрів задля оптимізації її властивостей та функціоналізації.

4.2. Основні завдання Проєкту (до 400 знаків)

Побудувавши статистично-термодинамічну модель гібридного твердого розчину втілення–заміщення, в якому атоми неметалу, втілені в октаедричні міжвузля, з підвищенням температури можуть частково переходити у вузли металеві ОЦК(Т)-гратниці з вакансіями, для $\alpha''\text{-Fe}_{16}\text{N}_2$ -фази Fe–N-мартенситу з атомами N у міжвузлях і на вузлах ОЦТ-заліза дослідити її термодинамічні, структурні та магнітні характеристики.

4.3. Детальний зміст Проєкту:

- Сучасний стан проблеми (до 400 знаків)

Мартенситна фаза $\alpha''\text{-Fe}_{16}\text{N}_2$ 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 $\alpha''\text{-Fe}_{16}\text{N}_2$ — 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)

Оглянувши й проаналізувавши літературні (експериментальні та теоретичні) дані стосовно тетрагонального мартенситу з легувальними елементами втілення–заміщення та вакансіями, розвинувши статистично-термодинамічну 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, з'ясовано як рівноважна концентрація залишкових вузлових вакансій (у широкому діапазоні зміни загального вмісту втілених атомів неметалу) співвідноситься з концентрацію термічно активованих вакансій на вузлах бездомішкового ОЦК-металу за тієї ж температури. Розраховано криву залежності рівноважної концентрації залишкових вузлових вакансій від загального вмісту втілених атомів N (у широкому діапазоні його зміни). За профілем одержаної кривої оцінено значення відносної концентрації втілених атомів N, за яких (для заданої температури) власне відбувається спонтанний перехід частини атомів N з октаедричних міжвузловин у вузли ОЦТ-Fe. Визначено значення концентрації, за якої можливий перехід

атомів N на вузли ОЦТ-гратниці Fe за фіксованої температури. Одержано вирази з явним внеском обмінної взаємодії магнітних моментів іонів металу у виразі для енергії змішання та неявним у виразі для ентропії магнітної підсистеми. Це уможливило розрахунок температурних залежностей параметрів атомного та магнітного (намагніченості) порядків за різних значень спінових чисел «залізної» підсистеми. Наявність залишкових вакансій сприяє поліпшенню магнітних властивостей досліджуваної системи, підвищуючи її температуру Кюрі. Тиск (або деформація) може змінювати знак швидкості зміни параметра атомного (магнітного) порядку; тому сплав, який упорядковується (розупорядковується) за нульового (атмосферного) тиску, може зазнати розупорядкування (впорядкування) під дією тиску або деформації. Вирішальним фактором у виборі сплаву сценарію атомного перерозподілу в ньому є очевидна «конкуренція» температури й тиску або деформації як зовнішніх чинників.

Детально наукові результати виконання проєкту (у вигляді нових знань) висвітлено у науковому звіті та у наведеному нижче **переліку публікацій та апробацій** (що містять подяку Національному фонду досліджень України за підтримку).

Статті:

1. Radchenko T.M., Gatsenko O.S., Lizunov V.V., Tatarenko V.A. Martensitic α'' -Fe₁₆N₂-type phase of non-stoichiometric composition: current status of research and microscopic statistical-thermodynamic model. *Progress in Physics of Metals*. 2020. Vol. 21. No. 4. P. 580–618. <https://doi.org/10.15407/ufm.21.04.580> (квартиль **Q2** у Scimago; категорія **«A»** у переліку наукових фахових видань України)
2. Левчук К.Г., Радченко Т.М., Татаренко В.А. Високотемпературні ентропійні ефекти у тетрагональності впорядкованого розчину втілення–заміщення на основі ОЦТ-металу. *Металознавство та новітні технології*. 2021. Т. 43. № 1. С. 1–26. <https://doi.org/10.15407/mfint.43.01.0001> (квартиль **Q3** у Scimago; категорія **«A»** у переліку наукових фахових видань України)

Монографії (розділи у книгах):

3. Radchenko T.M., Gatsenko O.S., Lizunov V.V., Tatarenko V.A. Research trends and statistical-thermodynamic modelling the α'' -Fe₁₆N₂-based phase for permanent magnets. *Emerging Applications of Low Dimensional Magnets*. Vol. 2 (прийнято до друку).

Тези конференцій (апробації):

4. Радченко Т.М., Гаценко О.С., Лізунов В.В., Татаренко В.А. Статистична термодинаміка твердого розчину втілення–заміщення: модель впорядкованої мартенситної фази α'' -Fe₁₆N₂. *Сучасні проблеми фізики металів і металічних систем*: Тези доповідей конференції (Київ, 25–27 травня 2021). Київ, 2021. С. 19. <https://www.imp.kiev.ua/?lang=ukr&a=conference&chapter=mpmms-2021>
5. Radchenko T.M., Gatsenko O.S., Lizunov V.V., Tatarenko V.A. Statistical-Thermodynamic Model of Martensitic α'' -Fe₁₆N₂-Type Phase as a Rare-Earth-Free Candidate for Permanent Magnets. *E-MRS 2021 Spring Meeting*. (online, June 2, 2021). S.III.2. <https://www.european-mrs.com/substitution-and-recycling-critical-raw-materials-optoelectronic-magnetic-and-energy-devices-iii>
6. Гаценко О.С., Лізунов В.В., Радченко Т.М., Татаренко В.А. Статистична термодинаміка впорядкованої фази α'' -Fe₁₆N₂ з атомами N у міжвузловинах і на вузлах ОЦТ-Fe. *Сучасне матеріалознавство. Матеріали та технології (СММТ-2021)*: Матеріали всеукраїнської конференції молодих вчених (Київ, 19–20 жовтня 2021). Київ, 2021. С. 29. <https://www.imp.kiev.ua/mmsmt>

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

Одержані 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 близько року) 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 наукових публікаціях та у заключному звіті, а також апробовано на міжнародних і вітчизняних наукових конференціях, в тому числі й серед молодих вчених. Висвітлені результати сприяють розумінню фізичної природи явищ, що відбуваються у мартенситі типу α'' -Fe₁₆N₂.

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

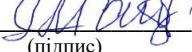
Науковий керівник Проєкту

завідувач відділу теорії металічного стану

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

д.ф.-м.н., с.н.с.

Радченко Тарас Михайлович



(підпис)