**Звіт про науково-дослідну роботу:** „ Особливості наноструктури, властивості плівок і об’ємних композитів на основі тугоплавких сполук Ті, (V, Nb), АL, Ва, Lа, Sn з неметалами"

**Мета роботи** - вивчення механізмів формування наноструктури і її впливу на механічні і електрофізичні властивості плівкових і об’ємних композитів на основі тугоплавких сполук Ті,Nb,Аl,Ва,Lа,Sn з Si,В,С,N,0.

**Терміни виконання наукової роботи**: початок І кв. 2012 р.

 закінчення IV кв. 2014 р.

 **Керівник роботи**: Іващенко Володимир Іванович, д.ф.-м.н., (Email:petro@ipms.kiev.ua )

 **Скорочений зміст висновків рецензентів.**

 Робота являє успішне експериментально - теоретичне дослідження актуальних технологій і матеріалів. Розроблена магнетронна технологія може бути рекомендована після подальшого удосконалення для впровадження у виробництво. Теоретичні моделі, запропоновані в дослідженні, являють собою вагоме підгрунтя для інтерпретації властивостей наноструктурованих і аморфних покриттів. Тематичні завдання були виконані в повному обсязі.

**Пропозиції про подальше використання результатів роботи.**

 Результати можуть бути використані: при розробці новітніх надтвердих тонких покриттів; для пояснення властивостей гетероструктур та інтерфейсів, із котрих формуються нанокомпозити; в технології виготовлення товстих плівок для виготовлення датчиків, резисторів; при синтезі твердих об’ємних композитів на основі тугоплавких сполук.

 Дані про реєстрацію роботи: № 0112U002088

**РЕФЕРАТ**

 **Мета роботи** - вивчення механізмів формування наноструктури і її впливу на механічні і електрофізичні властивості плівкових і об’ємних композитів на основі тугоплавких сполук Ті,Nb,Аl,Ва,Lа,Sn з Si,В,С,N,0.

 **Об’єкт дослідженя** - плівкові і об’ємні матеріали на основі сполук Ті,Nb,Аl,Ва,Lа,Sn з Si,В,С,N,0, наноструктура, механічні і електрофізичні властивості.

**Методи дослідження** - установка для дуального магнетронного розпилення, плазмохімічна установка, технологічне обладнання для виготовлення товстих плівок шляхом трафаретного друку, технологічна установка для синтезу об’ємних зразків. Для дослідження зразків використано: рентгеноструктурний аналіз, наноіндентування, трибологічні і адгезійні тести, оптичний профілометр, інфрачервона і рентгенелектронна спектроскопії, установки для дослідження електрофізичних властивостей, атомний силовий мікроскоп (АСМ).

 Було вивчено: наноструктуровані NbN, Nb-Si-N, Nb-А1-N, Ті-Si-N, Ті-АІ-Si-В-N покриття; наношаруваті ТіN/SiС покриття. Запропоновано теоретичні моделі гетероструктур МN(М=Ті,Zг,Nb)/ХУ=ВN,АLN,SіС,SіN та твердих розчинів LаВ6- ВаВ6; Осаджено і вивчено тонкі аморфні SiCN плівки. З метою розробки ефективних матеріалів для чутливих елементів газових сенсорів виготовлено пасти та товсті плівки на основі нанодисперсного Sn0,97,Sb0,0302 мікродисперсного Sn02 та їх сумішей. Досліджено концентраційні залежності електроопору та знайдено поріг перколації. Проведено розрахунки за розробленою методикою та експерименти із застосуванням АСМ товщин нанорозмірних діелектричних прошарків, що зумовлюють функціональні властивості гранульованих товстих плівок. Проведено дослідження з лазерної обробки плівок.

Об’ємні матеріали на основі ТіВ2-ТіSі2-АLN і Тi-Si-С формувалися шляхом баротермічної обробки вихідних сумішей в умовах високих тисків (5 ГПа) та температур. У таких термодинамічних умовах формувалися композиційні матеріали на основі дибориду титану, нітриду алюмінію та продуктів реакційних взаємодій: Ti5Si3; А12Ті05 та твердих розчинів ТіВ2 - ТіSі2. Виявлено особливості фазоутворення у зазначених системах при реакційних взаємодіях вихідних речовин та формування відповідних фізико-механічних характеристик отриманих керамічних композитів.

Ключові слова: НАНОСТРУКТУРОВАНІ ПОКРИТТЯ, АМОРФНІ І ГРАНУЛЬОВАНІ ПЛІВКИ, КОНСОЛІДАЦІЯ ПОРОШКІВ, МЕХАНІЧНІ І ЕЛЕКТРО-ФІЗИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ, ТУГОПЛАКА КЕРАМІКА, ДИБОРИД ТИТАНУ, КРИСТАЛІЧНА СТРУКТУРА, ФАЗОУТВОРЕННЯ.

Публікації

Ivashchenko V. I. Comparative first-principles study of TiN/SiNx/TiN interfaces / V. I. Ivashchenko, S. Veprek, P. E. A. Turchi, V. I. Shevchenko // Phys. Rev. B. - 2012. - V. 85. - P. 195403-15.

Ivashchenko V. I. First-principles study of TiN/SiC/TiN interfaces in superhard nanocomposites / V. I. Ivashchenko, S. Veprek, P. E. A. Turchi, V. I. Shevchenko, // Phys. Rev. B.-2012.-V. 86. - P. 014110-8.

Abadias G. Structure, phase stability and elastic properties in the Tii.xZrxN thin-film system: Experimental and computational studies / G. Abadias, V. I. Ivashchenko, L. Belliard, Ph. Djemia // Acta Materialia. - 2012. - V. 60. - P. 5601-5614.

Ivashchenko V. I. First-principles study of phase stability of Ti2N under pressure / V. I. Ivashchenko, P. E.A. Turchi, V. I. Shevchenko, E. I. Olifan // Phys. Rev. B. - 2012. -V. 86. - P. 064109-7.

Ivashchenko V. I. Effect of inhomogeneous deformation on the electronic structure of Sn02 and SnxSb1-­хО2 phases / V. I . Ivashchenko, В. M. Rud, A. G. Gonchar, L. A. Ivashchenko, O. O. Butenko // Powder Metallurgy and Metal Ceramics. - 2012. - V. 51. - P.

Ivashchenko V. I. Phase transformation B1 to B2 in TiC, TiN, ZrC and ZrN under pressure / V. I. Ivashchenko, P. E. A. Turchi, V. I. Shevchenko / Condensed Matter Physics. - 2013,-V. 16, №. 3.-P. 33602-9.

Ivashchenko V. I. First-principles molecular dynamics study of the thermal stability of the BN, AIN, SiC and SiN interfacial layers in TiN-based heterostructures: Comparison with experiments / V. I. Ivashchenko, S. Veprek // Thin Solid Films. - 2013. - V. 545. - P. 391-400.

Сукач А. В. Електричні та фотоелектричні властивості гетеропереходів a-SiCN/c-Si / А. В. Сукач, В. В. Тетьоркін, В. І. Іващенко, О. К. Порада, А. О. Козак, А. І. Ткачук, А. Т. Ворощенко // Оптоэлектроника и полупроводниковая техника. - 2013. - Вип. 48, - С.115- 123.

Ivashchenko V. I. Models of the Interfaces in Superhard TiN-Based Heterostructures and Nanocomposites from First-Principles / У. I. Ivashchenko. S. Veprek. P. Turchi, J. Leszczynski // Practical Aspects of Computational Chemistry III / [ed. by J. Leszczynski and M. K. Shuklal. -Springer US, 2014.-P. 45-91.

Ivashchenko V. I. First-principles quantum molecular dynamics study of TixZri1-xN(l 1 l)/SiNy heterostructures and comparison with experimental results / V. Ivashchenko, S. Veprek, A. Pogrebnjak and B. Postolnyi // Sci. Technol. Adv. Mater. - 2014. - V. 15.-P. 025007-11.

Ivashchenko V. I. First-principles molecular dynamics investigation of thermal and mechanical stability of the TiN(001)/AlN and ZrN(001)/AlN heterostructures / V. I. Ivashchenko, S. Veprek, P. E. A. Turchi, V. I. Shevchenko, J. Leszczynski, L. Gorb, F. Hill // Thin Solid Films. - 2014. - V. 564. - P. 284-293.

Turchi P. E. A. First-principles study of the Pd-Si system and Pd(001)/SiC(001) hetero­structure / P. E. A. Turchi, V. I. Ivashchenko // J. Nuclear Materials, - 2014. - V. 454. - P. 308— 314.

Ivashchenko V. I. Characterization of SiCN thin films: experimental and theoretical investigations / V. I. Ivashchenko, A. O. Kozak, О. K. Porada, L. A. Ivashchenko, О. K. Sinelnichenko, O. Lytvyn, T. V. Tomila, V. J. Malakhov // Thin Solid Films. - 2014. - V. 569. - P. 57-63.

Оноприенко А. А. Структура и механические свойства Ti-Al-Si-B-N пленок, осажденных методом магнетронного распыления / А. А. Оноприенко, В. И. Иващенко, И. А. Подчерняева, О. Ю. Хижун, И. И. Тимофеева, О. А. Бутенко // Порошковая металлургия. - 2014. - № 6. - Р. 126-134.

Ivashchenko V. I. First-principles Quantum Molecular Dynamics Study of TixZr1-xN(lll)/SiNy Heterostructures / V. I. Ivashchenko, S. Veprek, A.D. Pogrebnjak // Nanomaterials: Applications and Properties: the International Conf., September 17-22, 2012 y.: proceedings. - Crimea, 2012. - V. 1, №. 3. - P. 03PCSI (5p.)

Иващенко В. И. Влияние неоднородной деформации на электронную структуру легированного сурьмой диоксида олова / В. И. Иващенко, Б. М. Рудь, А. Г. Гончар, Л. А. Иващенко, О. О. Бутенко // Порошковая металлургия. - 2012. - № 5/6. - С. 131-140.

Гончар А. Г. Влияние баротермической обработки на свойства легированного сурьмой диоксида олова / А. Г. Гончар, Б. М. Рудь, А. И. Быков, В. Е. Шелудько, В. В. Кременицкий // Порошковая металлургия. - 2012. - N3/4. - С. 82-89.

Рудь Б. М. Получение и структура магниторезистивных толстых пленок на основе дисперсного Ni3B / Б. М. Рудь, Е. Я. Тельников, А. К. Марчук, А. Г. Гончар, А. А. Рогозинская // Порошковая металлургия. - 2013. - N5/6. - С. 142-149.

Ткаченко В. Г. Взаимосвязь между электронной структурой и дисперсними свойствами магниевых сплавов / В. Г. Ткаченко, А. И. Кондрашев, Н. И. Симан [и др.] // Металлургия и новейшие технологи. - 2013, - V. 35, №. 6. - С. 751-762.

Shelud’ko V. Е. Modification of the Structure and Properties of Ni3B-Based Thick Films by the Action of Laser Radiation / V. E Shelud’ko, A. V. Paustovsky, В. M. Rud’, E. Ya. Telnikov, P. S. Smertenko, V. V. Kremenitsky, I. V. Zakharchenko // Surfase engineering and applied electrochemistry. Allerton Press, Inc. - 2014. - V.50, N5. - P. 419—426.