**Звіт про науково-дослідну роботу: „ Розвиток наукових основ високотемпературної капілярності з можливим застосуванням обчислення з перших принципів адгезії та ступеню змочування, експериментальне дослідження адгезійної взаємодії оксидів металів IVа групи періодичної системи (SiO2, GeO2, SnO2) на межі з металами та вивчення електрофізичних властивостей контакту”**

**Мета роботи** - подальший розвиток фізико-хімічних основ високотемпературної капілярності металічних розплавів, які знаходяться в контакті з новими групами оксидних матеріалів, та розробка методів керування адгезійними процесами. Проведене комплексне дослідження міжфазної взаємодії, адгезії та змочування розплавленими металами діоксиду олова.

Терміни виконання наукової роботи: початок І кв. 2014 р.

закінчення IV кв. 2017 р.

**Керівник роботи**: Найдіч Юрій Володимирович д.т.н., академік НАНУ, (Email:naidich@ipms.kiev.ua)

**Скорочений зміст висновків рецензентів.**

Виконано значний обсяг експериментальних досліджень та отримано комплекс нових даних, що стосуються контактної взаємодії та процесів змочування в різних газових середовищах металевими розплавами керамічних матеріалів на основі оксидів металів IVа групи періодичної системи, зокрема SnO2. Результати роботи сприяють розвитку фізико-хімічних основ процесів змочування та адгезійних явищ і мають широкий вихід у практику матеріалознавства, зокрема, у технологіях паяння, створення нових композитів; робота актуальна, виконана на високому рівні та заслуговує позитивної оцінки.

**Пропозиції про подальше використання результатів роботи.**

1. Більш детальне вивчення впливу пропускання електричного струму через міжфазну границю на адгезійні властивості контакту металічних розплавів з керамічними матеріалами з метою керування капілярними процесами; 2) Розширення досліджень щодо визначення адгезії та змочування плівок діоксиду олова, нанесених на поверхню твердих тіл (оксидів та інш.) металічними розплавами; 3) Більш інтенсивне впровадження метал-кисневої технології у практику паяння керамічних матеріалів з іонно-ковалентним типом зв’язку.

Дані про реєстрацію роботи: № 0114U002427

**РЕФЕРАТ**

**Об’єкти дослідження** – керамічні матеріали на основі оксидів металів IVа групи періодичної системи та тверді розчини на їх основі (SnO2, SnO2–1Fe2O3, SnO2–0,5CuO, а також SiO2 як об’єкт для порівняння).

**Мета роботи** – подальший розвиток фізико-хімічних основ високотемпературної капілярності металічних розплавів, які знаходяться в контакті з новими групами оксидних матеріалів, та розробка методів керування адгезійними процесами. Проведене комплексне дослідження міжфазної взаємодії, ад гезії та змочування розплавленими металами діоксиду олова. Встановлені особливості процесів змочування металевими розплавами (чистими металами та деякими сплавами) для підкладок SnO2 в різних газових середовищах: у вакуумі, гелії, повітрі, чистому кисні та вуглекислому газі. Отримано концентраційні, часові та температурні залежності крайових кутів змочування для низки металевих розплавів на SnO2. Для покращення змочування використовувалися сполуки з високою спорідненість до електрону (зокрема, кисень) як альтернативний метод легування металічних розплавів. Вивчений вплив парціального тиску кисню на змочування SnO2–кераміки. Досліджено вплив електричного струму на змочування у повітрі кераміки на основі SnO2 (а також ZrO2–кераміки у вакуумі) розплавами Ag, Ag–Cu. Проаналізована залежність адгезійних процесів від сили струму та часу витримки. Проведені експерименти по змочуванню в CO2 підкладок із сталі, нікелю та SnO2 припоєм ПСР-72, Ag та Cu. На основі теорії функціонала густини (DFT) проведено розрахунки структури кристалічної решітки SnO2, а також електронної структури в об’ємі кристалу. Розраховано рівні енергії основного стану одноелектронних орбіталей (Кона-Шема), атомні сили, напруження, а також структурна оптимізація та розрахунок зонної структури і густини електронних станів (DOS). **Ключові слова:** змочування, адгезія, кінетика, Металічний розплав, оксиди.

**Публікації**

Найдіч Ю. В., Красовський В. П., Дуров О. В., Сидоренко Т. В. Вплив електронегативних елементів на змочування та паяння іонних та іонно-ковалентних керамічних матеріалів металевими розплавами // Адгезия расплавов и пайка материалов, 2016. – № 49. – С. 3-21.

Сидоренко Т.В., Полуянська В.В. Диоксид олова: будова, властивості, застосування та перспективи подальшого дослідження його капілярних властивостей. Огляд. // Адгезия расплавов и пайка материалов, 2015. – № 48. – С. 15-48.

Найдич Ю.В., Сидоренко Т.В., Лупин Б.К. Смачивание диоксида олова расплавами системы серебро-медь на воздухе // Адгезия расплавов и пайка материалов, 2015. – № 48. – С. 11 – 14.

Полуянська В. В., Сидоренко Т. В., Найдіч Ю. В. Змочування у вакуумі кераміки на основі SiO2 кремнійвміщуючими сплавами // Адгезия расплавов и пайка материалов, 2016. – № 49. – С. 22-28.

Дуров А. В., Сидоренко Т. В. Влияние пропускания электрического тока на смачивание ZrO2-керамики металлами в вакууме // Адгезия расплавов и пайка материалов, 2016. – № 49. – С. 113-118.

Григоренко М. Ф., Черніговцев Є. П., Найдіч Ю. В. Оцінка можливості здійснення деяких металургійних процесів (плавка, синтез сплавів, пайка) у середовищі, наближеному до атмосфери на планеті Марс // Адгезия расплавов и пайка материалов, 2016. – № 49. – С. 29-34.

Найдич Ю.В., Полуянская В.В., Сидоренко Т.В. Особенности смачивания в вакууме оксидов IV-a группы расплавами чистых металлов // МЕЕ-2016: Тезисы докладов. – Коблево, Украина, 2016. – С. 46.

Naidich Yu. V., Poluyanskaya V.V., Sydorenko T.V. Wetting of Tin (IV) Oxide by Some Pure Metal Melts in Vacuum // E-MRS Fall Meeting: abstracts. – Warsaw, Poland, 2016. – P. 412.

Сидоренко Т.В., Лупин Б.К., Найдич Ю.В. Исследование смачивания керамики на основе SnO2 расплавами системы Ag–Cu–O на воздухе // 5я Международная конференция HighMatTech-2015 (5 – 8 Окт. 2015 г., Киев, Украина), 2015. – С. 53.

Sydorenko T., Naidich Yu. Joining of some perovskite ceramic materials using air-brazing technology // LÖT-2016: 11th Int. Conf. of Brazing, High Temperature Brazing and Diffusion Bonding:  abstracts. – Aachen, Germany, 2016. – Р. 68.

Дуров А.В., Cидоренко Т.В., Найдич Ю.В. Влияние электрического тока, пропущенного через межфазную границу, на смачивание оксидной керамики // 8-я Международная конференция «Материалы и покрытия в экстремальных условиях…»: тезисы докладов – Киев, 2014. – С. 71.

Durov A.V., Sydorenko T.V., Naidich Yu.V. Effect of Electric Current Passing Through the Interface on the Wetting of Oxide Ceramics with Silver–Copper–Oxygen Melt in Air // Powder Metallurgy and Metal Ceramics, 2015. – Volume 54, Issue 3. – pp 201-203.

Durov O.V., Sydorenko T.V. Electrowetting of Tin (IV) Oxide by Ag-Cu-O Melts in Air Media // E-MRS Fall Meeting: abstracts. – Warsaw, Poland, 2016. – P. 418.

Сидоренко Т.В. Использование припоев на основе системы Ag-Cu-О для пайки на воздухе и металлизации перовскитной керамики // Адгезия расплавов и пайка материалов, 2015,  № 48. – С. 103–107.

Naidich Yu. V., Krasovskyy V. P., Durov O. V., Sydorenko T. V. Wettability and Brazing of Iono–Ionocovalent Ceramic Materials by Metal Alloys Containing Electronegative Elements // Proc. of 6th Int. Conference on Brazing and Soldering, April 19-22, 2015, Long Beach, CA, P. 40-48.

Sydorenko T.V., Naidich Y.V. Wetting and contact interaction of tin dioxide ceramic material with Ag-Cu-O alloys // E-MRS FALL MEETING: abstracts. – Warsaw, Poland, 2014 – P. 271 (S7).

Naidich Y.V., Sydorenko T.V., Poluyanskaya V.V. Speciality of Wetting and Contact Interaction of Tin Oxide Ceramics with Some Liquid Metals // E-MRS Fall Meeting: abstracts. – Warsaw, Poland, 2015. – P. 136 (F-18).

Найдич Ю.В., Дуров А.В., Сидоренко Т.В. Влияние пропускания электрического тока через межфазную границу на смачивание оксидной керамики расплавами медь-серебро-кислород в воздушной среде // Порошковая металлургия, 2015. – № 3-4. – С. 21–24.

Grigorenko M. F., Chernigovtsev E. P. Spreading and wetting kinetics study for some model systems with physical type of interaction E-MRS FALL MEETING: abstracts. – Warsaw, Poland. – 2014. – P. 24.

Григоренко М. Ф., Черніговцев Е. П. Вивчення капілярних явищ на міжфазовій поверхні рідина1―тверде тіло―рідина2 з використанням модельних систем, що імітують стан мікрогравітації/невагомості // Адгезия расплавов и пайка материалов – 2014. –  № 47. – С. 14-24.

Grigorenko M. F., Chernigovtsev E. P. Capillary Phenomena Studies at Liquid1-Solid-Liquid2 Interphase Using a Number of Low Temperature Model Systems Imitating Microgravity // E-MRS FALL MEETING: abstracts. – Warsaw, Poland. – 2015. – P. 135.

Naidich Yu., Grigorenko M., Chernigovtsev  E. Capillary-transport processes under microgravity conditions about possibility to realize some metallurgical technologies in CO2 atmosphere similar to that of Mars planet / Report to COSPAR / Space research in Ukraine. 2014–2016 / Ed. O. Fedorov. — K. :Akadem periodyka, 2016. — P. 104-108

23. Naidich Y., Grigorenko M., Chernigovtsev E. About possibility to REALIZE some metallurgical technologies  in CO2 atmosphere similar to that of mars planet. E-MRS FALL MEETING: abstracts. – Warsaw, Poland.  – 2017. – P. 42.

Naidich Yu.V., Poluyanskaya V.V., Sydorenko T.V. Investigation of Capillary and Adhesion Properties of Binary Metal Melts on Tin Dioxide Surface // E-MRS Fall Meeting: abstracts. – Warsaw, Poland, 2017.

Найдіч Ю.В., Сидоренко Т.В., Полуянська В.В. Особливості адгезійних та капілярних явищ в системах SnO2 – металічний розплав // Адгезия расплавов и пайка материалов, 2017. – № 50. – С. 3-14.

Найдич Ю.В., Сидоренко Т.В. Влияние парциального давления кислорода на смачивание диоксида олова // Адгезия расплавов и пайка материалов, 2017. – № 50. – С. 15-20.