**Звіт про науково-дослідну роботу: „ Дослідження фізико-хімічної взаємодії та термодинамічних властивостей багатокомпонентних систем, утворених 3d- та 4d-металами і алюмінієм з бором, вуглецем, оловом, рідкісноземельними та іншими елементами як наукових засад розробки нових багатокомпонентних матеріалів: композиційних на основі наноламінатів (MAX-фаз); титан-алюмінідів та інших металідів і багатокомпонентних твердих розчинів як конструкційних та функціональних матеріалів з особливими властивостями”**

**Мета роботи** - — одержання нової наукової інформації про та фазові рівноваги у багатокомпонентних системах, утворених 3d- та 4d-металами і алюмінієм з бором, вуглецем, оловом, рідкісноземельними та іншими елементами та термодинамічні властивості сплавів; визначення областей можливого використання досліджених сплавів і формулювання відповідних рекомендацій на основі результатів дослідження властивостей, вибраних в залежності від очікуваного призначення: композиційних на основі наноламінатів (MAX-фаз); титан-алюмінідів та інших металідів і багатокомпонентних твердих розчинів як конструкційних та функціональних матеріалів з особливими властивостями.

Терміни виконання наукової роботи: початок І кв. 2016 р.

закінчення IV кв. 2018 р.

**Керівник роботи**: Великанова Тамара Яківна, д. х. н., (Еmail:velikanova@ipms.kiev.ua)

**Скорочений зміст висновків рецензентів**.

Одержана наукова інформація є надійним довідниковим матеріалом, який буде включений у відповідні довідники та бази даних. Представлені у звіті дані, а також конкретні рекомендації щодо їх використання для розробки нових матеріалів чи покращення існуючих, будуть корисні для хіміків, фізиків та матеріалознавців, які розробляють нові матеріали різноманітного призначення.

Рецензована робота є продовженням традиційних для відділу фізичної хімії неорганічних матеріалів систематичних досліджень фазових рівноваг та термодинамічних властивостей сплавів металічних систем. З урахуванням високого наукового потенціалу колективу виконавців звіту, що рецензується, і актуальності роботи для сучасного матеріалознавства, вважаю за необхідне рекомендувати подальше продовження і розвиток таких досліджень. Вважаю, що виконана робота заслуговує на високу оцінку.

Одержані дані становлять значний внесок у фізико–хімічний фундамент сучасного матеріалознавства і переконливо свідчить про великий науковий потенціал колективу виконавців. Усе це є підставою рекомендувати подальший розвиток робіт у цьому напрямку як одному з пріоритетних у матеріалознавстві.

**Пропозиції про подальше використання результатів роботи.**

Нові дані щодо діаграм стану та термодинамічних властивостей можна рекомендувати до включення у відповідні довідники та бази даних.

Дані про реєстрацію роботи: № 0116U003506

**РЕФЕРАТ**

**Об’єкт дослідження** — сплави систем Al–Ti–Mo (Pt), Ru–Rh–Ir, Al–Cr–Co, TiZrNi (Cu), CrAlC, Ti–Со–Sn, Ti–V (Cr)–Si, Co–Zr, Ni–Zr та ZrCo–ZrNi; бінарні розплави Ni–Nd (Sm, Eu, Yb, Lu), Ti (Cr, Mn, Ni)–Sb, Ce–Sn, потрійні розплави Ce–In (Sn, Sb)–Ni,  
 Ce–Mn–Sb, Al–Ag–Yb.

**Мета роботи** — одержання нової наукової інформації про та фазові рівноваги у багатокомпонентних системах, утворених 3d- та 4d-металами і алюмінієм з бором, вуглецем, оловом, рідкісноземельними та іншими елементами та термодинамічні властивості сплавів; визначення областей можливого використання досліджених сплавів і формулювання відповідних рекомендацій на основі результатів дослідження властивостей, вибраних в залежності від очікуваного призначення: композиційних на основі наноламінатів (MAX-фаз); титан-алюмінідів та інших металідів і багатокомпонентних твердих розчинів як конструкційних та функціональних матеріалів з особливими властивостями.

**Методи дослідження** — мікроструктурний (МСА), рентгенівський фазовий (РФА), локальний рентгеноспектральний (ЛРСА), диференційний термічний (ДТА) аналізи; Пірані–Альтертума; скануюча електронна мікроскопія (СЕМ); енергетично–дисперсійна рентгенівська спектроскопія (ЕДРС); диференційна скануюча калориметрія (ДСК); термодинамічне моделювання методом CALPHAD; високотемпературна калориметрія змішування ізопериболічного типу; розрахунки за вдосконаленими авторами моделями — ідеальних асоційованих розчинів, “геометричними” і Редліха-Кістера.

Досліджено фазові рівноваги та вперше побудовані (або уточнені) діаграми стану потрійних систем Al–Ti–Mo (Pt), Hf–Pd–Pt, Ru–Rh–Ir, Al–Cr–Co, TiZrNi (Cu), CrAlC, Ti–Со–Sn, Ti–V (Cr)–Si, ZrCoNi та подвійних Co–Zr і Ni–Zr в широкому інтервалі концентрацій та температур (включаючи області кристалізації сплавів), які представлено у вигляді ізотермічних перерізів і політермічних розрізів, проекцій поверхонь ліквідуса і солідуса, діаграм плавкості, реакційних схем. В рамках CALPHAD–процедури отримано термодинамічний опис потрійних систем Al–Ti–Mo і TiFeB у повному концентраційному інтервалі. Проведено критичний огляд літературних даних щодо фазових рівноваг у потрійній системі Hf–Pd–Pt. Вперше визначено термодинамічні властивості бінарних розплавів Ni–Nd (Sm, Eu, Yb, Lu), Ti (Cr, Mn, Ni)–Sb, Ce–Sn та потрійних розплавів Ce–In (Sn, Sb)–Ni, Ce–Mn–Sb і Al–Ag–Yb. Виявлено 3 нових потрійних сполуки, встановлено спосіб їх утворення і параметри стабільності.

**Ключові слова**: ДІАГРАМА СТАНУ, ФАЗОВІ РІВНОВАГИ, ДІАГРАМА ПЛАВКОСТІ, ТЕРМОДИНАМІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, ЕНТАЛЬПІЯ, ЕНТРОПІЯ, ЕНЕРГІЯ ГІББСА, РОЗПЛАВ.

**Публікації**

1. Тhermodynamic Modeling of the Ternary B–Mo–Ti System with Refined B–Mo Description / V.T. Witusiewicz, A.A. Bondar, U. Hecht та ін. // J. Alloys and Compounds. — 2016. — Vol.655. — P. 336–352. — doi: 10.1016/j.jallcom.2015.09.158.
2. Phase Transformations and Phase Equilibria in the Co–Sn–Ti System in the Crystallization Interval / I. Fartushna, M.Bulanova, R.M. Ayral та ін. // J. Solid State Chemistry — 2016. — Vol.244. — P. 93–99. — doi: 10.1016/j.jssc.2016.09.013.
3. Phase Equilibria in the Crystallization Interval in the Ti–Co–Sn System at above 50 at.% Ti / Iu. Fartushna, M. Bulanova, R.M. Ayral та ін. // J. Alloys and Compounds. — 2016. — Vol.673. — P. 433–440. — doi: 10.1016/j.jallcom.2016.01.160.
4. Термодинамические свойства сплавов двойной системы Gd–In / М.А. Шевченко,  
    М.И. Иванов, В.В. Березуцкий, В.С. Судавцова // Журн. физ. химии. — 2016. — Т.90,  
    № 1. — С. 3–12. — doi: 10.1134/S0036024415120274.
5. Термодинамические свойства сплавов двойной системы Bi–Yb / М.А. Шевченко,  
    М.И. Иванов, В.В. Березуцкий, В.С. Судавцова // Журн. физ. химии. — 2016. — Т.90,  
    № 4. — С. 500–512.
6. Термодинамические свойства сплавов двойной системы In–Yb / М.А. Шевченко,  
    М.И. Иванов, В.В. Березуцкий, В.С. Судавцова // Журн. физ. химии. — 2016. — Т.90,  
    № 6. — С. 649–658.
7. Термодинамические свойства сплавов двойной системы In–La / М.А. Шевченко,  
    М.И. Иванов, В.В. Березуцкий, В.С. Судавцова // Журн. физ. химии. — 2016. — Т.90,  
    № 6. — С. 823–836.
8. Термодинамічні властивості сплавів подвійної системи Al–Pr / М.О. Шевченко,  
    В.В. Березуцький, М.І. Іванов, В.С. Судавцова // Порошковая металлургия. — 2016. —  
    № 1–2. — С. 114118.
9. Семенова О.Л. Фазові структурні перетворення у сплаві Zr50Co25Ni25 / О.Л. Семенова, Ж.-К.Теденак, О.С. Фомічов // Порошковая металлургия. — 2016. — № 5–6. —  
    С. 111–119.
10. Термодинамічні властивості розплавів системи Al–La–Ni / П.М. Суботенко,  
     В.Г. Кудін, М.О. Шевченко та ін. // Порошковая металлургия. — 2016. — № 9–10. —  
     С. 124133.
11. Термодинамічні властивості сплавів системи La–Ni / П.М. Суботенко, В.Г. Кудін,  
     М.О. Шевченко та ін. // Порошковая металлургия. — 2016. — № 11–12. — С. 114123.
12. Термодинамічні властивості і фазові рівноваги в сплавах системи Sn-Ce /  
     В.С. Судавцова, М.О. Шевченко, В.Г. Кудін, А.С. Козорезов // Современные проблемы физического материаловедения. Вып.25: Труды ИПМ Францевича НАНУ. — К., 2016. — С.131136.
13. Термодинамічні властивості сплавів системи Ni-Sb / К.Ю. Пастушенко, В.С. Судавцова, П.П. Левченко та ін. // Современные проблемы физического материаловедения. Вып.25: Труды ИПМ Францевича НАНУ. — К., 2016. — С.155–161.
14. Mechanical Behavior of Homogeneous and Nearly Homogeneous Pseudoelastic Ti3Sn: Role of Composition and Microstructure / О. Vdovychenko, O. Ivanova, Yu. Podrezov,  
     M. Bulanova // Materials and Design. — 2017. — Vol.125. — P. 26–34. —   
     doi: 10.1016/j.matdes.2017.03.074.
15. Термодинамические свойства жидких сплавов меди с лантаном / В.С. Судавцова,  
     М.А. Шевченко, М.И. Иванов та ін. // Журнал физической химии. — 2017. — Т.91, № 6. — С. 937–944.
16. Термодинамические свойства сплавов двойной системы Sb–Yb / В.С. Судавцова,  
     М.А. Шевченко, М.И. Іванов та ін. // Журн. физ. химии. — 2017. — Т.91, № 7. —  
     С. 1102–1110.
17. Термодинамические характеристики и фазовые равновесия в сплавах системы Ge–La / М.А. Шевченко, В.Г. Кудин, В.С. Судавцова та ін. // Журн. физ. химии. — 2017. —  
     Т.91, № 8. — С. 1264–1272.
18. Фазові рівноваги в системі Cu–Ti–Zr при температурі 750 С. І. Ізотермічний переріз при вмісті міді від 0 до 50% (ат.) / А. М. Сторчак-Федюк, Л. В. Артюх, Л. А. Дума та ін. // Порошковая металлургия. — 2017. — № 1–2. — С. 101–113.
19. Термодинамічні властивості сплавів подвійної системи Co–Pr / В.С. Судавцова,  
     М.О. Шевченко, В.Г. Кудін та ін. // Порошковая металлургия. — 2017. — № 1–2. —  
     С. 122131.
20. Семенова О.Л. Діаграма стану квазібінарної системи ZrCo–ZrNi / О.Л. Семенова, В.М. Петюх, О.С. Фомічов // Порошковая металлургия. — 2017. — № 3–4. —  
     C. 118–130.
21. Фазові рівноваги в системі Cu–Ti–Zr при температурі 750 С. ІІ. Ізотермічний переріз при вмісті міді від 50 до 100% (ат.) / А. М. Сторчак-Федюк, Л. В. Артюх, А. В. Гриців та ін. // Порошковая металлургия. — 2017. — № 3–4. — С. 131–142.
22. Термодинамічні властивості сплавів подвійної системи Al–Nd / М.О. Шевченко,  
     В.С. Судавцова, В.Г. Кудін та ін. // Порошковая металлургия. — 2017. — № 5–6. —  
     С. 123148.
23. Термодинамические свойства сплавов двойной системы Ba–In / М.А. Шевченко,  
     В.Г. Кудин, М.И. Іванов та ін. // Порошковая металлургия. — 2017. — № 11–12. —  
     С. 109115.
24. Влияние Cu, Ag, Au на энергетику взаимодействия в сплавах системы Ge-Yb /  
     Л.А. Романова, В.С. Судавцова, В.Г. Кудин, М.И. Иванов // Современные проблемы физического материаловедения. Вып.26: Труды ИПМ Францевича НАНУ. — К., 2017. — С.231235.
25. Взаємодія в сплавах систем 3d-Me–Sb / К.Ю. Пастушенко, М.І. Іванов, В.С. Судавцова, М.О. Шевченко // Адгезия расплавов и пайка материалов. — Вып.50. — К., 2017. — С.4456.
26. Термодинамічні властивості і фазові рівноваги в сплавах систем La-Sn, La–Ni–Sn /  
     В.С. Судавцова, П.П. Левченко, К.Ю. Пастушенко та ін. // Адгезия расплавов и пайка материалов. — Вып.50. — К., 2017. — С. 83–93.
27. Thermodynamic Re-Modelling of the Ternary Al–Mo–Ti System Based on Novel Experimental Data / V.T. Witusiewicz, A.A. Bondar, U. Hecht та ін. // J. Alloys and Compounds. — 2018. — Vol.749. — P. 1071–1091. — doi:10.1016/j.jallcom.2018.03.283.
28. Термодинамические свойства сплавов двойной системы Sn–Yb / В.С. Судавцова,  
     М.А. Шевченко, М.И. Иванов та ін. // Журн. физ. химии. — 2018. — Т.92, № 4. —  
     С. 628–637.
29. Phase Equilibria in the Aluminum Corner of the Al–Ti–Pt System /  
     O.V. Zaikina, V.G. Khoruzha, K.E. Kornienko, T.Ya. Velikanova // Powder Metallurgy and Metal Ceramics. — 2018. — Vol.57, № 1–2. — P. 114–126. — doi: 10.1007/s11106-018-9959-z.
30. Термодинамiчнi властивостi та фазовi рiвноваги в сплавах системи CeSn /  
     В.С. Судавцова, К.Ю. Пастушенко, М.А. Шевченко та ін. // Порошкова металургія. — 2018. — № 7–8 — C. 136–144.
31. Фазові рівноваги у потрійній системі AlTiPt. I. Поверхня солідуса системи AlTiPt в області складів 0–50% (ат.) Pt / О.В. Заїкіна, В.Г. Хоружа, К.Є. Корнієнко та ін. // Порошкова металургія. — 2018. — № 9–10. — C. 111–123.
32. Фазові рівноваги у потрійній системі AlTiPt. II. Поверхня ліквідуса системи AlTiPt в області складів 0–50% (ат.) Pt / О.В. Заїкіна, В.Г. Хоружа, К.Є. Корнієнко та ін. // Порошкова металургія. — 2018. — № 11–12. — C. 108–115.
33. Bondar A. Al–Co–Cr Ternary Phase Diagram Evaluation [Електронний ресурс] / A. Bondar, K. Korniyenko // G. Effenberg (ed.), MSI Eureka, MSI, Materials Science International, Stuttgart. — 2018. — Document ID: 10.10906.2.2. — Режим доступу: http://www.msi-eureka.com/preview-html/ 10.10906.2.2/Al-Co-Cr\_Ternary-Phase-Diagram-Evaluation. — Заголовок з титул. екрану.
34. Korniyenko K. Hf–Pd–Pt Ternary Phase Diagram Evaluation [Електронний ресурс] / K. Korniyenko. // G. Effenberg (ed.), MSI Eureka, MSI, Materials Science International, Stuttgart. — 2018. — Document ID: 10.15360.1.4. — Режим доступу: http://www.msi-eureka.com/preview-html/10.15360.1.4/Hf-Pd-Pt\_Ternary-Phase-Diagram-Evaluation. — Заголовок з титул. екрану.
35. Phase Equilibria in the Cr–Si–Ti System below 40 at.% Si / M. Bulanova, J.C. Tedenac,  
     I. Fartushna та ін. // J. Alloys and Compounds (у друці).
36. Фазові рівноваги у потрійній системі AlTiPt. III. Діаграма плавкості системи AlTiPt в області складів 0–50% (ат.) Pt / О.В. Заїкіна, В.Г. Хоружа, К.Є. Корнієнко, Т.Я. Великанова // Порошкова металургія (у друці).