**Звіт про науково-дослідну роботу: „ ПОБУДОВА МОДЕЛЕЙ ТА ВИКОНАННЯ НА ЇХ ОСНОВІ ОБЧИСЛЮВАЛЬНИХ ЕКСПЕРИМЕНТІВ, ЯКІ СПРЯМОВАНО НА ВИЗНАЧЕННЯ, ДОСЛІДЖЕННЯ ТА ПРОГНОЗ ФІЗИКО-МЕХАНІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ І ОПТИМІЗАЦІЮ ТЕХНОЛОГІЙ ОДЕРЖАННЯ КОНСТРУКЦІЙНИХ ТА ЗАХИСНИХ КОМПОЗИТНИХ МАТЕРІАЛІВ НА ОСНОВІ СПОЛУК З ІКОСАЕДРИЧНИМИ СТРУКТУРНИМИ ФРАГМЕНТАМИ B12C3(B4C), B12OX(B6O), B12Si2(SiB6), AlB12”**

**Мета роботи** - розробка основних принципів комп’ютерного конструювання нових перспективних керамічних матеріалів на основі тугоплавних сполук та побудови алгоритмів їх організації.

 Терміни виконання наукової роботи: початок І кв. 2018р.

 закінчення IV кв. 2020 р.

 **Керівник роботи**: Галанов Борис Олександрович, д. ф.-м.н., (Email:vvk@ipms.kiev.ua)

 **Керівник роботи**: Картузов Валерій Васильович, к.ф.-м.н.,( Email:vvk@ipms.kiev.ua)

 **Скорочений зміст висновків рецензентів.**

 Рецензенти дають позитивну оцінку роботі. Зазначають, що дослідження виконано на усій шкалі структурних рівней за чіткою схемою підготовки, проведення та аналізу результатів спрямованого обчислювального експерименту. Робота є багатоплановою. За результатами моделювання на атомному рівні авторами розроблено методику оцінки експлуатаційних характеристик композиційних матеріалів з використанням цих сполук. Згідно з наведеними в звіті розрахунками очікується високий рівень питомих фізико-механічних властивостей. Результати є важливими для розроблення нових надлегких матеріалів у тому числі для бронезахисту та захисту поверхонь гіперзвукових транспортних засобів. Дуже вагомий перелік публікацій за темою мають високий науковий рівень. Це дає підставу для їх схвалення і рекомендації продовження цього напрямку досліджень.

**Пропозиції про подальше використання результатів роботи.**

 Розроблені сукупності фізичних і математичних моделей для визначення властивостей, закономірностей та механізмів руйнування композитних матеріалів на основі високобористих сполук з ікосаедричними структурними фрагментами конструкційного і функціонального призначення при квазістатичному та ударному навантаженні шляхом комп’ютерного моделювання на макрорівні, мезорівні, мікрорівні стануть основою теоретичної бази створення конструкційних та функціональних композиційних наноматеріалів, експлуатаційні характеристики яких будуть більш високими ніж у існуючих.

 Дані про реєстрацію роботи: № 0118U003061

 **РЕФЕРАТ**

**Об’єкт дослідження**- композитні матеріали конструкційного та функціонального призначеня

з керамічними, металокерамічними та металічними матрицями.

**Мета роботи**- розробка основних принципів комп’ютерного конструювання нових

перспективних керамічних матеріалів на основі тугоплавних сполук та побудови алгоритмів їх організації.

**Методи досліджень** - комп’ютерне моделювання, рентгеноструктурний та хімічний аналіз. За результатами імітаційного моделювання фрагментів структури бору,

 борида алюмінію і борида магнію квантово- хімічними методами з перших принципів у рамках кластерного підходу,

розраховані значення хімічної твердості по Віккерсу розглянутих матеріалів.

Показана кореляція мультифрактальних характеристик зразків осадженого магнетронним розпиленням титану з міцностними характеристиками.

Запропонована і протестована методологічна блок-схема вирішення задачі отримання кераміки на основі AlB12C2 та її випробувань.

Розроблено методику для визначення модулів пружності, твердості,

 межплинності матеріалів і характерного розміру пластичної зони ударостійких

 матеріалів на основі тугоплавких сполук приладами інструментального індентування з безперервним записом діаграм:сила, що діє на індентор – зближення індентора і зразка.

**Ключові слова:** ТУГОПЛАВКІ СПОЛУКИ, BIG DATA, МАТЕРІАЛИ-ПРОТОТИПИ, КРИСТАЛІЗАЦІЯ, ЕВТЕКТИКА, САМООРГАНІЗАЦІЯ АТОМІВ, ОБЧИСЛЮВАЛЬНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ.

 **Публікації**

1. Бекенев В. Л., Зубкова С. М. (від.4). Атомная и электронная структура поверхности 3C-SiC(111)-(2√3 × 2√3)-R30°  // Физика твердого тела. – 2018. – Т.60. –Выпуск 10. – С. 2033-2044.
2. Красикова И. Е., Красиков И. В., Картузов  В. В. Мультифрактальные характеристики композитов AlB12-AlN // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Труды ИПМ НАН Украин. – 2018. – Выпуск 20. – С.  92-97.
3. Лукович В. В., Картузов В. В. Корозія на мікронерівностях поверхні металу // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Труды ИПМ НАН Украин. – 2018. – Выпуск 20. – С. 10-17.
4. Хачатрян А. В. Физические характеристики эквиатомных никелевских сплавов и их связь с дисторсиями // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Труды ИПМ НАН Украин. – 2018. – Выпуск 20. – С. 115-120.
5. Закарян Д. А., Хачатрян А. В. Теоретическая прочность и предел текучести кристалів // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Труды ИПМ НАН Украин. – 2018. – Выпуск 20. – С. 64-67.
6. Хачатрян А. В. Методика оцінки твердості металів та металевих ВЕС на основі фізичних параметрів обчислення з перших принципів // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Труды ИПМ НАН Украин. – 2018. – Выпуск 20. – С. 28-32.
7. Зубкова С. М., Бекенев В. Л. Теоретическое изучение (111) А поверхности кубического карбида кремния // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Труды ИПМ НАН Украин. – 2018. – Выпуск 20. – С. 68-32.
8. Лукович В. В. Розрахунок параметрів катодного захисту відрізка трубопроводу за умови відшарування ізоляції від його поверхні // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Труды ИПМ НАН Украин. – 2018. – Выпуск 20. – С. 3-9.
9. Галанов Б. А., Иванов С. М., Картузов В. В. Прядко А.А. Учет теплообмена фронта дробления и уплотнения разрушенного материала с материалом, окружающим этот фронт, при расширении сферической полости // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Труды ИПМ НАН Украин. – 2018. – Выпуск 20. – С. 47-57.
10. Быстренко А. В., Галанов Б. А., Иванов С. М., Картузов В. В. Модель формирования эвтектических композитов методом направленной кристаллизации // Математические модели и вычислительный эксперимент в материаловедении. Труды ИПМ НАН Украин. – 2018. – Выпуск 20. – С. 57-63.
11. Galanov B. A., Kartuzov V. V., Ivanov S. M., Pryadko A. A. Evaluation of Temperature Jump at the Front of Comminution and Compaction of the Ceramic Target Material at High-Velocity Impact // Ceramic Engineering and Science Proceedings. – 2018. – Volume 38. – Issue 2, In book: Proceedings of the 41st International Conference on Advanced Ceramics and Composites, P.165-174, DOI: [10.1002/9781119474678.ch16](http://dx.doi.org/10.1002/9781119474678.ch16).
12. Pepelyshev A., Borodich F. M., Galanov B. A., Gorb E. V., Gorb S. V. Adhesion of Soft Materials to Rough Surfaces: Experimental Studies, Statistical Analysis and Modelling // [Coatings](https://www.researchgate.net/journal/2079-6412_Coatings). 2018; 8(10):350, DOI: 10.3390/coatings8100350.
13. Borodich, F. M., Galanov, B. A., Perepelkin, N. V., Prikazchikov, D. A. 2018. Adhesive contact problems for a thin elastic layer: Asymptotic analysis and the JKR theory. Mathematics and Mechanics of Solids. https://doi.org/10.1177/1081286518797378.
14. Л.И. Овсянникова. Атомная структура и энергия когезии кластеров ZnSe и CdSe. Физика твердого тела, 2019, 61, №4, 786-792.
15. Н. М. Роженко, О. М. Григорьєв, В. В. Картузов. Метод аналізу форми дифракційних ліній, що не потребує переходу до простору об’єкта // Доповіді Національної Академії Наук України. – 2019. – №1. – С. 47–54.
16. Валеева И.К., Кириченко О.В Получение пористых материалов из металлических волокон и экспресc-методы определения размеров их пор // Порошковая металлургия. 2019, № 3/4 С.41–50.
17. В.Л. Бекенев, Е.А. Ефимова, В.В. Картузов, Л.М. Куликов. Адсорбция паров воды бездефектными монослоями дихалькогенидов d-переходных металлов // Матем. модели и вычисл. эксперимент в материаловедении. – К.: Труды ИПМ НАНУ, 2019. – Вып. 21. С.3-9.
18. В.В.Лукович, В.В.Картузов. Потенціал в області мікронерівностей поверхні металу // Матем. модели и вычисл. эксперимент в материаловедении. – К.: Труды ИПМ НАНУ, 2019. – Вып. 21. С.10-17.
19. В.В.Лукович. Про поляризацію трубопроводу у випадку відшарування ізоляції від його поверхні // Матем. модели и вычисл. эксперимент в материаловедении. – К.: Труды ИПМ НАНУ, 2019. – Вып. 21. С. 83-91.
20. Д.А. Закарян. Межфазные границы в квазибинарных эвтектических системах // Матем. модели и вычисл. эксперимент в материаловедении. – К.: Труды ИПМ НАНУ, 2019. – Вып. 21. С.64-67.
21. А.В.Хачатрян. Упрочнение в металлических сплавах, связь с физическими характеристиками // Матем. модели и вычисл. эксперимент в материаловедении. – К.: Труды ИПМ НАНУ, 2019. – Вып. 21. С. 98-103.
22. Д.А. Закарян. Влияние размерного фактора на характерные параметры квазибинарных боридных эвтектических систем // Матем. модели и вычисл. эксперимент в материаловедении. – К.: Труды ИПМ НАНУ, 2019. – Вып. 21. С. 110-114.
23. K. Valeeva, O.V. Kirichenko, Production of Metallic Fiber Materials and Determination of Pore Sizes// Powder Metallurgy and Metal Ceramics, (2019)  58(3), Р. 155-162. <https://doi.org/10.1007/s11106-019-00059-y>.
24. Borodich F.M., Galanov B.A., Perepelkin N.V., Prikazchikov D.A. Adhesive contact problems for a thin elastic layers: Asymptotic analysis and JKR theory. Mathematic and Mechanics of Solids (2019) Vol. 24(5), 1405 – 1424, DOI: [10.1177/1081286518797378](http://dx.doi.org/10.1177/1081286518797378).
25. Kossovich E.L., Borodich F.M., Epshtein S.A., Galanov B.A., Minin M.G.,  Prosina V. A. Mechanical, structural and scaling properties of coals: depth-sensing indentation studies.  Appl. Phys. A (2019) 125: 195. <https://doi.org/10.1007/s00339-018-2282-1>.
26. D. Zakarian, A. Khachatrian, S. Firstov. Universal temperature dependence of Young’d modules   // Metal Powder Report, Elsevier- 2019.  - V.74, Issue 4. - P.204-206.
27. Galanov B. A., Kartuzov V. V., Ivanov S. M., Pryadko A. A. Evaluation of Temperature Jump at the Front of Comminution and Compaction of the Ceramic Target Material at High-Velocity Impact // Ceramic Engineering and Science Proceedings. – 2020
28. Закарян Д.А., Хачатрян  А.В. Нанорозмірні квазібінарні евтектичні системи і їх характерні параметри / Успіхи матеріалознавства - Київ: ІПМ ім.І.М.Францевича НАН України, 2020, #1, C.17-25.
29. Лукович В.В. Про поляризацію трубопроводу у випадку відшарування ізоляції від його поверхні / Успіхи матеріалознавства - Київ: ІПМ ім.І.М.Францевича НАН України, 2020, #1, C.40-45.
30. Валєєва І. К. Адгезійний контакт пружних тіл зі стохастичною шершавістю// Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка, Серія: фізико-математичні науки, 2020 № 2, C. 4 стор.
31. Galanov B.A., Ivanov S.M., Kartuzov V.V., Improved core model of the indentation for the experimental determination of mechanical properties of elastic-plastic materials and its application / Mechanics of Materials 150 (2020) 103545.
32. Kossovich E.L., Borodich F.M., Epshtein S.A., Galanov B.A., Indentation of bituminous coals: Fracture, crushing and dust formation / Mechanics of Materials 150 (2020) 103570.
33. D. Zakarian, A. Khachatrian Calculation of the Hardness of a Multi-Element Equiatomic Metal Alloy // Modern Approaches on    Material Science 2 (3) 2020. 226-230.
34. D. Zakarian, A. Khachatrian Determination of the Modulus of Elasticity from Size Factor and Temperature // Singapore Journal of Scientific Research.- 2020.- 10: 378-386.
35. D. Zakarian, A. Khachatrian Determination from First Principles of The Melting Point and Temperature Dependence of the Theoretical Strength Modern Approaches on Material Science 3 (3) 2020. 388-390.
36. V. Bekenev, V. Kartuzov, E. Kartuzov, L. Kulikov (від. 16). Adsorption of water vapor by monolayers of layered transition metal dichalcogenides - first-principle calculations // 10-th International conference ADVANCED MATERIALS, AND TECHNOLOGIES: FROM IDEA TO MARKET, 24-26 October, 2018, Ninghai, China.
37. V. Bekenev, O. Bystrenko, E. Kartuzov, V. Kartuzov. Using  effective potentials in modeling of boron-containing ceramics (molecular dynamics) // 42nd International Conference and Expo on Advanced Ceramics and Composites (ICACC 2018), 21-26 January, 2018, Daytona Beach, USA.
38. V. Bekenev, O. Bystrenko, E. Kartuzov, V. Kartuzov. Molecular-dynamic simulation of the shock wave propagation in cubic boron nitride // Mach Conference, 4-6 April, 2018, Annapolis, Maryland.
39. Валеева И.К., Кириченко О.В. Определение размеров пор фильтрующих материалов из волокон коррозионностойкой стали для работы в экстремальных условиях // Тр.Міжнар.наук.конф. «Матеріали для роботи в екстремальних умовах – 8», 6-7 грудня 2018 року, Київ, 2018.
40. О.Д. Хращевський, М.О. Єфімов, К.О. Єфімова, О.І. Дудка. МОДИФІКАЦІЯ ПРИПОВЕРХНЕВИХ ОБЛАСТЕЙ СТАЛІ 45 ІМПУЛЬСНОЮ ПЛАЗМОВОЮ ОБРОБКОЮ. VIІІ Міжнародна наукова конференція «Матеріали для роботи в екстремальних умовах – 8». Україна, Київ, НТУУ «КПІ», 6 грудня - 7 грудня 2018.
41. Khachatrian, S. Firstov. Ab - initio methods for calculating a physical characteristics of nickel based metal alloys. Euro PM2018 Congress & Exhibition, Bilbao, Spain.-14-18. 10.2018. p.128.
42. Khachatrian. Ab Initio method of describing a lattice distortions of metallic high-entropy alloys. Euro PM2018 Congress & Exhibition, Bilbao, Spain.-14-18. 10.2018. p.129.
43. Khachatrian, D. Zakarian, V. Kartuzov. The relationship of hardening with the energy of interaction of atomic planes in high-entropy alloys (HEAs). 10-th International conference ADVANCED MATERIALS, AND TECHNOLOGIES: FROM IDEA TO MARKET, 24-26 October, 2018, Ninghai, China.
44. D. Zakarian, A. Khachatrian, V. Kartuzov. Temperature dependence of the modulus of elasticity of materials. 10-th International conference ADVANCED MATERIALS, AND TECHNOLOGIES: FROM IDEA TO MARKET, 24-26 October, 2018, Ninghai, China.
45. D. Zakarian, A. Khachatrian. Theoretical and real ultimate strength of crystals. NANO-2018.- 23-26 th August, Kyiv.
46. Irina Krasikova, Igor Krasikov, Valery Kartuzov. Quantitative characterization of the structure of metallic films from their electron-photographic images. 10-th International conference ADVANCED MATERIALS, AND TECHNOLOGIES: FROM IDEA TO MARKET, 24-26 October, 2018, Ninghai, China.
47. Borodich F. M., Galanov B. A. Interpretation of Nanoindentation Tests Using Mechanics of Adhesive Contact. ESMC10 – 10th European Solid Mechanics Conference, 2 July 2018 – 6 July 2018, Bologna, Italy, <http://www.esmc2018.org/drupa18/>
48. L. Ovsiannikova, G. Lashkarev, V. Kartuzov, M. Godlewski (R. Pietruszka Institute of Physics Polish AcSci, Warsaw,Poland). The study of formation energy for ZnO native defects and their interaction with donor Al impurity in ZnO by the help of fullerene like model. 47st "Jaszowiec" International Scool and Conference on the Physics of Semiconductors, Krynica-Zdroj, Poland, june, 2018.
49. L.Ovsiannikova, V. Kartuzov, G. Lashkarev, M. Dranchuk. Using the fullerene-like clusters model for the solution of engineering problems for semiconductor nanomaterials. VIII «Української наукової конференції з фізики напівпровідників» УНКФН-8 Ужгород, Україна, 2 - 4 жовтня, 2018.
50. E.Kartuzov, V.Kartuzov, S.Ivanov, B.Galanov. Comparative Analysis of Response to High Velocity Impact of new Ceramic materials Based on High-boron Compounds Developed at IPMS NASU. 42 International Conference and Exposition on Advanced Ceramic Composites, January 21-26, 2018.
51. E.Kartuzov, V.Kartuzov, O.Mikhaylov. Computer modelling of projectile’s penetration into discrete armor panel. 42 International Conference and Exposition on Advanced Ceramic Composites, January 21-26, 2018.
52. E.Kartuzov, V.Kartuzov. Participation of Dr. V.Kartuzov, Dr. E.Kartuzo. Molecular-dynamic simulation of shock wave propagation in B13-C2 ceramics. 42 International Conference and Exposition on Advanced Ceramic Composites, January 21-26, 2018.
53. V. Kartuzov, B.Galanov, S.Ivanov. Evaluation of size of zone of effective heating near Mescal zone in ceramic at Hypervelocity impact. 2018 Much Conference, April 4-6, Annapolis, Maryland, USA.
54. V.Kartuzov, I. Kartuzov, V.Bekenev, O.Bystrenko. Atomic modelling of high-speed compression of defective samples of boron carbide. 2018 Much Conference, April 4-6, Annapolis, Maryland, USA.
55. Mazur P.V., Muratov V.B., Garbuz V.V., Vasiliev O.O., Kartuzov V.V., Compozit ceramics AlB12-AlN. E-MRS Fall Meeting. 17-20 September 2018, Warsawa, Poland.
56. Muratov V.B., Garbuz V.V., Vasiliev O.O., Mazur P.V., Kartuzov V.V. Phase formation in the D4C- Al at the temperatures up to 1400B. E-MRS Fall Meeting. 17-20 September 2018, Warsawa, Poland.
57. Muratov V.B., Garbuz V.V., Vasiliev O.O., Mazur P.V., Kartuzov V.V. AlB12C2 science of refractory compounds. VI Международная Самсоновская конференция "Материаловедение тугоплавких соединений и композитов". НТУУ «КПІ». 22-24 травня 2018 р. Киев, Украина. С.109.
58. O.V. Bystrenko, V.L. Bekenev, I.V. Kartuzov, V.V. Kartuzov.  Modeling of influence of structural defects in cubic sic on its interaction with shock waves // 43nd International Conference and Expo on Advanced Ceramics and Composites (ICACC 2019), 27 January – 1 Febrary, 2019, Daytona Beach, USA.
59. L. I. Ovsiannikova, V. V. Kartuzov, G. V. Lashkarev, D. V. Myroniuk, M. V. Dranchuk, A. I. Ievtushenko. The investigation of the behavior of Al, Ga, In impurities in ZnO lattice by a fullerene-like model. Proceeding of 6thinternational conference HighMatTech 2019, October 2830, 2019, Kyiv, Ukraine. P.62.
60. Rogenko N. N., Timofeeva I.I., Krapivka M.O. INVESTIGATION OF CLUSTERS IN SOLID SOLUTIONS OF HIGH ENTROPY ALLOYS. HighMatTech2019, October 28-30, 2019, Kyiv, Ukraine, P.5.
61. Валеева И.К., Галанов Б.А. Моделирование адгезионного контакта шероховатых тел // ТЕЗИ VI Наукової конференції «Нанорозмірні системи: будова, властивості, технології» НАНСИС-2019 4–6 грудня 2019 р. Київ, Україна С.214.
62. D. Zakarian, A. Khachatrian, V. Kartuzov. Temperature dependence of the elastic modulus of quasi-binary eutectic composites //AAAFM – UCLA -2019, 19-22 August, University of Calfornia, Los Angeles, USA, p.190.
63. D. Zakarian, A. Khachatrian, V. Kartuzov.The nfluence of the size factor on the formation of eutectic //NANO -2019, Lviv Polytechnic National University, 27-30 August.
64. D. Zakarian, A. Khachatrian.  Dimensional and temperature dependence of the elastic modulus //6th International Conference “Nanotechnology” (GTUnano20), October 5 – 8, 2020, in Tbilisi, Georgia, Dedicated to the memory of Prof. Alex Gerasimov.
65. D. Zakarian, A. Khachatrian. Моделирование прироста твердости металлических многоэлементных сплавов Modeling the increase in hardness of metal multielement alloys AAFM – UCLA -2020, 19-22 August, University of Calfornia, Los Angeles, USA, p.190.
66. Zakarian D.A., Khachatrian A.V. Anisotropy of mechanical properties of nanoscale materials with a cubic crystal lattice //NANO-2020. Nanocomposites and nanomaterials, Lviv (2020).
67. Krasikova I., Krasikov I., Kartuzov V Mechanisms of the interaction of transport protein with multifractal analysis of electron microscopic images of nanomaterials — 1st International Research and Practice Conference “Nanoobjects & Nanostructuring” (N&N – 2020). N&N – 2020 Book of Abstracts. September 20–23, 2020, Lviv, Ukraine. P. 97.
68. Валеева И.К., Кириченко О.В. Уплотнительный материал для компрессора газотурбинного двигателя на основе металлических волокон // Сб. тр. Міжнародної науково-технічної конференції "Матеріали для роботи в екстремальних умовах – 10", 10–11 грудня 2020р. Київ, КПІ, 2020, C. 3.