



**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ
ДОНЕЦКОЙ НАРОДНОЙ РЕСПУБЛИКИ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО
ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
"ДОНБАССКАЯ НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ
СТРОИТЕЛЬСТВА И АРХИТЕКТУРЫ"**

Согласовано:
Проректор по научной работе

_____ В.Ф. Мущанов
« ____ » _____ 2020 г.

Утверждаю:
Ректор

_____ Н.М. Зайченко
« ____ » _____ 2020 г.

**Отчет о научной работе кафедры
за 2020 год**

Зав. кафедрой «Физика и физическое
материаловедение»

_____ Фролова С.А.
Подпись ФИО

Утверждено на заседании кафедры
«Физика и физическое
материаловедение»

« ____ » _____ 2020 г., протокол №

Макеевка, 2020

Информация о выполнении госбюджетных (кафедральных) тем

Секция: Физика конденсированных сред.

Название приоритетного направления развития науки и техники: фундаментальные научные исследования по наиболее важным проблемам развития научно-технического, социально-экономического, общественно-политического, человеческого потенциала для обеспечения конкурентоспособности в мире и устойчивого развития общества и государства.

1. Тема НИР: «Развитие кластерно-коагуляционной модели неравновесной кристаллизации переохлажденных жидкостей».

2. Руководители НИР: Александров Валерий Дмитриевич, доктор химических наук, профессор, академик АН Высшей школы, заведующий кафедрой физики и физического материаловедения (до 17.06.2020 г.); Фролова Светлана Александровна, кандидат химических наук, доцент, заведующий кафедрой физики и физического материаловедения (с 17.06.2020 г.).

3. Номер государственной регистрации НИР: 0117D000270.

4. Номер учетной карточки заключительного отчета: -

5. Название высшего учебного заведения, научного учреждения: ГОУ ВПО «Донбасская национальная академия строительства и архитектуры».

6. Срок выполнения: начало – 03.04.2017, окончание – 31.12.2020 гг.

7. Предмет исследования. Закономерности влияния кинетики зародышеобразования и кристаллизации переохлажденных расплавов на структуру и свойства материалов.

8. Объект исследования. Цветные металлы и сплавы, кристаллогидраты и их смеси, низкомолекулярные органические вещества.

9. Суть процесса исследования. Суть процесса исследования в том, что в литературе отсутствуют систематические исследования относительно влияния зародышеобразования и кинетики кристаллизации переохлажденных расплавов разных веществ на структуру и свойства материалов, которые зависят от условий кристаллизации и влияния разных факторов. Поэтому эта работа направлена на исследования в этом направлении.

10. Основные научные результаты. Выполнен план работы по 4 этапу (2020 г.).

Обозначена кластерная структура бинарного сплава выше и ниже температуры плавления и ее влияние на формирование кристаллов с эвтектикой.

Проведен анализ динамики изменения кластерной структуры расплавов, образующих механические смеси и непрерывный ряд твердых растворов в процессе квазиравновесной и неравновесно-взрывной кристаллизации.

Подготовлен заключительный отчет.

11. Работали над кандидатскими диссертациями: асс. Покинтелица Е.А., асс. Греднев Д.С. Асс. Покинтелица Е.А. защитила кандидатскую диссертацию в марте 2020.

12. В работе принимали участие 5 студентов 1 и 2 курса обучения.

13. Цель и предмет работы.

Основная цель работы – экспериментальные и теоретические исследования кинетики зародышеобразования и массовой кристаллизации расплавов и растворов разных веществ,

влияния термической предыстории на параметры равновесной и неравновесной кристаллизации, структуру и свойства материалов.

14. Перечень основных заданий.

Этап 4. 09.01.2020р.-31.12.2020р.

Анализ термодинамических характеристик при образовании непрерывного ряда твердых растворов замещения из жидких растворов.

Анализ образования зародышей в виде твердых растворов замещения при кристаллизации бинарных жидких растворов.

Разработка схем кластерной структуры бинарного расплава выше и ниже температур плавления и ее влияния на формирование кристаллов с эвтектикой.

15. Реализация заданий работы.

Актуальность работы.

Важной проблемой в теории кристаллизации вещества в настоящее время является выяснение механизма взаимозависимости этапа зародышеобразования с последующим процессом массовой кристаллизации. Существующая флуктуационная теория не способна объяснить явления взрывной кристаллизации, эффекты поэтапного плавления и кристаллизации, наличия стойких и значительных переохлаждений и пр. Ввиду определенных трудностей прямого наблюдения за начальной стадией формирования кристалла, экспериментальных опытов по кинетике зародышеобразования, динамики развития зародышей, ее морфологии и текстуры, влияния разных дисперсных частиц и др. в настоящее время недостаточно для развития новых теорий кристаллизации.

Для дальнейшего развития теории зародышеобразования, роста кристаллов и массовой кристаллизации необходимо расширять класс исследуемых веществ, усовершенствовать традиционные и разрабатывать новые методики исследований, устанавливать новые закономерности и эффекты при фазовых превращениях, разрабатывать и анализировать неравновесные диаграммы состояния.

Результаты предыдущих наших исследований позволили установить ряд новых уникальных эффектов (скачкообразного перехода от равновесной кристаллизации без переохлаждения к неравновесной кристаллизации с физическим переохлаждением, отсутствие спонтанной кристаллизации в области метастабильного состояния расплава, построение диаграмм состояния сплавов с указанием областей физического переохлаждения, выявление таммановских зависимостей скорости зародышеобразования от переохлаждения при кристаллизации некоторых простых веществ, сплавов и химических соединений, факт уменьшения предкристаллизационного переохлаждения под действием инородных частиц и т.д.), которые содействует управлению структурой и свойствами получаемых материалов после кристаллизации. Вместе с тем имеющихся данных явно недостаточно для построения кластерно-коагуляционной теории кристаллизации.

Основными задачами этапа являлись экспериментальные термографические исследования влияния перегрева расплавов и растворов, времени выдержки выше и ниже температуры фазового превращения, скорости охлаждения, массы образцов и др. на параметры кристаллизации расплавов разных материалов; математическая обработка экспериментальных данных; исследование структуры и свойств материалов.

16. Основные научные результаты:

1. Проведен термодинамический анализ динамики изменения кластерной структуры расплавов, образующих механические смеси и непрерывный ряд твердых растворов в процессе квазиравновесной и неравновесно-взрывной кристаллизации. Обозначена кластерная структура бинарного сплава выше и ниже температуры плавления и ее влияние на формирование кристаллов
2. Проведены экспериментальные исследования сплавов в системе индий-свинец, образующих непрерывный ряд твердых растворов.

3. Рассчитаны критические размеры зародышей и работы их образования для сплавов в системе индий-свинец, энтальпии плавления и поверхностного натяжения на границе кристалл-расплав.
4. Рассчитаны активности компонентов и энергии их активации при температурах ликвидуса, солидуса и в области переохлаждения в двухкомпонентном сплаве галлий-олово.
5. Проведен расчет параметров зародышеобразования при равновесной и неравновесной кристаллизации на примере термограмм висмута.
6. Разработаны схемы изменения энтропии, энтальпии и энергии Гиббса для индивидуальных веществ при фазовых превращениях.
7. Получила свое дальнейшее развитие кластерно-коагуляционная теория кристаллизации на основе новых экспериментальных данных.
8. Подготовлен заключительный отчет.
9. Результаты работы опубликованы в 19 работах, из них: 8 статей, 8 тезисов докладов, апробированы на 5 международных конференциях.
10. В рамках научно-исследовательской работы принимали участие 5 студентов.
11. В рамках НИР работали над кандидатскими диссертациями асс. Покинтелица Е.А., асс. Греднев Д.С. Асс. Покинтелица Е.А. защитила кандидатскую диссертацию в марте 2020.

17. Преимущество этой работы над другими имеющимися аналогами заключается в том, что в литературе отсутствуют: систематические экспериментальные исследования кинетики кристаллизации переохлажденных расплавов и влияния внешних действий на параметры кристаллизации элементарных веществ, сплавов, химических соединений, кристаллогидратов, низкомолекулярных веществ и т.п. Из-за отсутствия системных исследований влияния разных факторов на кинетику кристаллизации, литературные данные по этой проблеме содержат много разногласий, которые не дают дальнейшего развития теории кристаллизации из переохлажденного состояния и получения надежных экспериментальных средств влияния на структуру и свойства изделий. Современная теория не способна объяснить явления взрывной кристаллизации, эффекты поэтапного плавления и кристаллизации, наличия устойчивых и значительных переохлаждений, влияния внешних воздействий на зародышеобразование при кристаллизации переохлажденных расплавов и др. Центральный вопрос в теории кристаллизации вещества (механизм формирования зародышей в расплаве) порой остается не выясненным, а существующие представления о зародышеобразовании достаточно дискуссионно. Ввиду определенных трудностей прямого наблюдения за начальной стадией формирования кристалла, экспериментальных опытов по кинетике зародышеобразования, динамики развития зародышей, ее морфологии и текстуры в настоящее время явным образом недостаточно для развития новых теорий кристаллизации.

18. Практическая ценность.

Практическое значение полученных результатов работы заключается в том, что проведенные исследования и выявленные эффекты позволят существенным образом управлять структурой и свойствами разных веществ.

Получен большой экспериментальный материал по измерению параметров кристаллизации, который интерес для дальнейшего развития теории и практики кристаллизации вещества, о физико-химической природе расплавов, углубление понимания взаимосвязи параметров кристаллизации со структурой и свойствами полученных кристаллов. Результаты работы планируется использовать в научно-исследовательских институтах и производстве.

Установка для циклического термического анализа и экспериментальные данные по влиянию термической предыстории и внешних действий на кристаллизацию расплавов и растворов - в Донецком национальном техническом университете; Институте металлургии им. А.А.Байкова РАН.

19. Ценность результатов для учебно-научной работы.

Некоторые результаты работы введены в учебный процесс таких курсов, как «Технология конструкционных материалов», «Материаловедение», "Физико-химическое

материаловедение", „Физика" (используются в лекционном курсе, лекционных демонстрациях, лабораторных работах). Например, разработаны лабораторные работы „Измерение электропроводности в кристаллогидратах при плавлении и кристаллизации", „Определение параметров кристаллизации растворов методом оптической микроскопии" и т.д.

Результаты работы докладывались на научных семинарах кафедры, на 5 международных конференциях различного уровня и были опубликованы в крупных научных журналах. Результаты работы за 2020 г. были рассмотрены и утверждены на заседании кафедры ФМ 11.12.2020 г, протокол № 3.

В выполнении этой работы принимают участие студенты. Вместе со студентами опубликовано 3 научных работ и доложены на 1 международной и 2 студенческих конференциях.

20. Перечень разработанной документации и образцов.

1. Аннотированный отчет за четвертый этап работы.
2. Методические указания к лабораторным работам.

21. Перечень научных публикаций, докладов на конференциях, семинарах.

№ п/п	Название	Вид работы	Выходные данные	Авторы
1.	Термодинамика и кинетика кристаллизации легкоплавких цветных металлов	монография	Донецк. – Донецк: «Донбасс». – 2020. – 351 с.	Александров В.Д., Фролова С.А.
2.	Термодинамика и кинетика кристаллизации низкомолекулярных органических веществ	монография	Донецк. – Донецк: «Донбасс». – 2020. – 350 с.	Александров В.Д., Постников В.А., Щебетовская Н.А., Покинтелица Е.А.
3.	Построение неравновесной диаграммы состояния системы галлий-олово и ее анализ	статья	Известия ВУЗов. Цветная металлургия – Москва. – 2020. –№ 1. –С. 39-47.	Александров В.Д., Зозуля А.П., Фролова С.А.
4.	Анализ энергии Гиббса при образовании эвтектик	статья	Металлы. – Москва. – 2020. – № 1. –С. 91-95.	Александров В.Д., Зозуля А.П., Фролова С.А.
5.	Construction of Gallium-Tin Nonequilibrium State Diagram and Its Analysis	статья	Russian Journal of Non-Ferrous Metals. –2020. – Vol. 61, No. 2. – PP. 172-178.	Aleksandrov V.D., Zozulia A.P. Frolova S.A.
6.	Расчет параметров зародышеобразования при равновесной и неравновесной кристаллизации	тезисы	Сборник научных трудов 10 международной конференции «Химическая термодинамика и кинетика». – 25-29.05.2020. – г. В.Новгород. –	Александров В.Д., Фролова С.А., Садова А.В.

			С. 15-16.	
7.	Параметры квазиравновесной и неравновесно-взрывной кристаллизации	статья	Вестник ДонНАСА, Выпуск 2020 - 4(144) стр. 71-75.	Александров В.Д., Фролова С.А., Садомова А.В.
8.	Термодинамика синтеза неорганических теплоаккумулирующих материалов на основе $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	тезисы	Материалы 13 симпозиума с международным участием «Термодинамика и материаловедение» (российско-китайский семинар). –26-30.10.2020. –г. Новосибирск. – С. 187.	Амерханова Ш.К., Фролова С.А., Шляпов Р.М., Уали А.С.
9.	Расчет активности компонентов в эвтектическом сплаве Sn-Bi	тезисы	Материалы с заданными свойствами на переходе к новому технологическому укладу: химические технологии: сб. материалов II научно-технической конференции. – Москва: НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА, 2020. – С. 177-178.	Фролова С.А., Амерханова Ш.К., Шкильнюк Д.А.
10.	Расчет размеров зародышей и работ их образования при кристаллизации кристаллогидратов	тезисы	Материалы с заданными свойствами на переходе к новому технологическому укладу: химические технологии: сб. материалов II научно-технической конференции. – Москва: НИЦ «Курчатовский институт» –	Соболь О.В.

			ИРЕА, 2020. – С. 177-178.	
11.	Построение неравновесной диаграммы состояния о-терфенил–м-терфенил	тезисы	Материалы с заданными свойствами на переходе к новому технологическому укладу: химические технологии: сб. материалов II научно-технической конференции. – Москва: НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА, 2020. – С. 177-178.	Покинтелица Е.А.
12.	Экспериментальные термограммы солевых растворов как информационный источник кристаллизации	тезисы	Сборник научных трудов 10 межд. Научной конференции «Химическая термодинамика и кинетика». – г. В. Новгород. – 05.2020. – С. 199.	Соболь О.В., Корвякова Н.П.
13.	Анализ жидко-кластерного состояния расплавов вблизи температуры плавления	статья	Журнал технической физики, 2020. – Т. 90, вып. 12. – С. 2028-2033.	В.Д. Александров, А.П. Зозуля, Е.А. Покинтелица, Н.В. Щебетовская
14.	Analysis of the Liquid – Cluster State of Melts near the Melting Point	статья	Technical Physics, 2020. – V. 65, № 12, pp. 1936 – 1942.	V.D. Aleksandrov, A.P. Zozulya, O.A. Pokyntelytsia, N.V. Shchebetovskaya
15.	Особенности кристаллизации эвтектических сплавов в системе кумарин – нафталин	тезисы	Десятая международная научн. конференция «Химическая термодинамика и кинетика» г. Великий Новгород, 25	Н.В. Щебетовская Е.В. Муконина

			мая – 29 мая, сборник научных трудов, 2020с. 276-277.	
16.	Однофакторный дисперсионный анализ свойств органических теплоаккумулирующих материалов	тезисы	Материалы с заданными свойствами на переходе к новому технологическому укладу: химические технологии: сб. материалов II научно-технической конференции. – Москва: НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА, 2020. – С. 177-178.	Щебетовская Н.В.
17.	Плавление и кристаллизация гидрохинона	тезисы	Материалы VI-й Республиканской научно-практической интернетконференции преподавателей, молодых учёных, аспирантов и студентов «Современные проблемы гуманитарных, естественных и технических наук». – Донецк, ГО ВПО ДонНУЭТ, № 6, 2020. – С. 35-36.	Н.В. Щебетовская, Е.В. Муконина

18.	О некоторых особенностях отработки угольных пластов в Донецко-Макеевском угленосном районе	статья	Вестник ДонНАСА, Выпуск 2020 - 3(143) стр. 78-81.	БОРИСЕНКО Э. В., КОРВЯКОВА Н. П., ШАЖКО Я. В., ШАЖКО О. В., СОБОЛЬ О. В.
19.	Альтернативная энергетика как путь решения глобальных экологических проблем	статья	Вестник ДонНАСА, Выпуск 2020 - 4(144) стр. 82-84.	КАРАМАНЕШТ Н. М., МАЛАШЕНКО Т. И., СОБОЛЬ О. В.
20.	Влияние влаги на трещиноватость горных пород	тезисы	Сборник тезисов 5 международной научно-практической конференции «Инновации в геологии, геофизике и географии». – 07-10.06.2020. – г. Севастополь. – С. 81-82.	КОРВЯКОВА Н. П., СОБОЛЬ О. В.
21.	Теплофизические особенности плавления и кристаллизации органических теплоаккумулирующих материалов группы дифенилов	автореферат	Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата технических наук. – Донецк. – 23.03.2020. – ГОУ ВПО «ДонНУ». – 187 с.	Покинтелица Е.А.

22. Основные выводы.

1. Методами ЦТА и ДТА исследована кинетика кристаллизации индивидуальных веществ и их смесей: индивидуальных веществ (висмута, олова, индия, галлия, свинца), кристаллогидратов солей натрия (ацетата натрия тригидрата, воды, десятиводного карбоната натрия, пятиводного тиосульфата натрия), низкомолекулярных углеводородов (дифенила, дифенилметана, дифенилэтана, нафталина, *o*-терфенила, *m*-терфенила, *p*-терфенила), сплавов и смесей в системах: Ga-Sn, In-Pb $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ - $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, эвтектических сплавов в системах Bi-Sn, нафталин-*o*-терфенил.

2. Впервые построена диаграмма состояния бинарных кристаллогидратов $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$ – $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$. Установлено, что эта система является диаграммой эвтектического типа, определены составы и температуры эвтектик. Установлена закономерность изменения переохлаждений и энтальпий плавления в зависимости от концентрации компонентов.

3. Для сплавов системы In-Pb установлено, что увеличение концентрации второго компонента приводит к уменьшению размеров критических зародышей, энтальпии плавления и межфазной поверхностной энергии твёрдого раствора, как со стороны первого, так и со стороны второго компонента, достигая определённого минимума.

4. Предложен новый метод расчета размеров кристаллических зародышей и работы их образования при гомогенной кристаллизации из переохлажденной жидкости. Установлено, что при расчете данным методом критические размеры зародышей близки к параметрам решеток исследуемых веществ. Сделан вывод о том, что в роли зародышей фактически выступают примерно от одной до трех элементарных ячеек, а работы их образования соответствуют энергиям связи в данных кристаллах.

5. Установлен температурный гистерезис, характеризующий отличие температуры плавления от равновесной температуры кристаллизации: для эвтектического сплава Sn + 43 мол.% Bi, воды. Показаны схемы изменения энтальпий фазовых превращений и путей изменения энергий Гиббса, характеризующие гистерезис. Термический гистерезис при плавлении и кристаллизации H_2O обусловлен тем, что лед не перегревается выше 0°C , а вода при НРВК кристаллизуется из переохлажденного состояния.

6. Методом визуальной политермии ацетата натрия тригидрата установлена зависимость линейной скорости продвижения фронта кристаллизации V от величины переохлаждения – $v = f(\Delta T^-)$. Данная зависимость имеет вид «кривой насыщения»

7. Проведён анализ активностей, коэффициентов активностей и энергий активации галлия, олова, висмута, эвтектического сплава Ga-Sn вблизи температур плавления и равновесной кристаллизации. Сделан вывод, что первоочередная кристаллизация соответствует веществам с большей активностью.

8. Установлено резкое увеличение переохлаждения с отсутствием взрывной кристаллизации для эвтектического сплава 20,5 вес.% нафталина-79,5 вес.% *o*-терфенила. Это связано с увеличением вязкости эвтектического сплава, основанная, видимо, на ассоциации разнородных молекул в крупные некристаллоподобные кластеры, создающие стерические помехи, мешающие перемещению «свободных» молекул и их встраиванию в упорядоченные структуры.

Список научных работ, опубликованных и принятых редакциями в печать в 2019 году в зарубежных изданиях, которые имеют импакт-фактор

№ п/ п	Авторы	Название работы	Название издания, в котором опубликована работа	Том, номер (выпуск, первая, последняя страницы работы)
1	Александров В.Д., Зозуля А.П., Фролова С.А.	Построение неравновесной диаграммы состояния системы галлий-олово и ее анализ	статья	Известия ВУЗов. Цветная металлургия – Москва. – 2020. – № 1. – С. 39-47.
2	Александров В.Д., Зозуля А.П., Фролова С.А.	Анализ энергии Гиббса при образовании эвтектик	статья	Металлы. – Москва. – 2020. – № 1. – С. 91-95.
3	В.Д. Александров, А.П. Зозуля, Е.А. Покинтелица, Н.В. Щebetовская	Анализ жидко-кластерного состояния расплавов вблизи температуры плавления	статья	Журнал технической физики, 2020. – Т. 90, вып. 12. – С. 2028-2033.

Сведения о научно-исследовательской работе и инновационной деятельности студентов, молодых ученых

Основные данные

Количество студентов, принимающих участие в научных исследованиях	Количество молодых ученых, работающих в учреждении	Количество молодых ученых, остающихся работать в учреждении после окончания аспирантуры
5	1	-

Участие студентов в НИР

всего	в т.ч. с опл.	х/т	г/т	каф./т
5				5

Публикации студентов / студентов с преподавателями / студентов под руководством преподавателей

№ п/ п	Авторы	Название работы	Название издания, в котором опубликована работа	Том, номер (выпуск, первая-последняя страницы работы)
1	Фролова С.А., Амерханова Ш.К., Шкильнюк Д.А.	Расчет активности компонентов в эвтектическом сплаве Sn-Bi	тезисы	Материалы с заданными свойствами на переходе к новому технологическому укладу: химические технологии: сб. материалов II научно-технической

				конференции. – Москва: НИЦ «Курчатовский институт» – ИРЕА, 2020. – С. 177-178.
--	--	--	--	--

Участие в конференциях других вузов (организаций)

№ п/п	Авторы	Название доклада	Данные о конференции (название, дата и место проведения)	Статус конференции
		нет		

Информация о научной и научно-технической деятельности, которая осуществлялась совместно с научными учреждениями ДНР

Название организации	Номер договора о сотрудничестве	Сроки выполнения	Ответственный	Информация о выполнении
ГУ Институт горных процессов, г. Донецк	02/05-17	02.05.2017- 02.05.2022	Доц. Соболев О.В	Проведены совместные экспериментальные исследования влияния термической предыстории на кинетику кристаллизации горных пород. Результаты доложены на 5 международной научно-практической конференции «Инновации в геологии, геофизике и географии». –07-10.06.2020. –г. Севастополь. – С. 81-82.

Развитие материально-технической базы для проведения научных исследований

№ п/п	Название прибора и его марка, фирма-производитель, страна происхождения	Использование прибора в разрезе научной тематики, которая выполняется кафедрой	Стоимость (руб.)
	нет	нет	нет