

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**  
федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

---

Инженерная школа новых производственных технологий

Отделение материаловедения

Направление подготовки: *Материаловедение и технологии материалов*

**БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА**

Тема работы
<b>Исследование структуры и свойств керамических твердых растворов, стабилизированных энтропией</b>

УДК 666.3:544.322

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
154Б71	Юй Яо		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения материаловедения	Елена Сергеевна Дедова	к.т.н.		

**КОНСУЛЬТАНТЫ:**

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент отделения социально- гуманитарных наук	Подопригора Игнат Валерьевич	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Скачкова Лариса Александровна			

**ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:**

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
22.03.01 Материаловедение и технологии материалов	Ваулина Ольга Юрьевна	к.т.н., доцент		

Планируемые результаты обучения по ООП 22.03.01 Материаловедение и технологии материалов (бакалавриат)

Код результата	Результат обучения
P1	Применять основные положения и методы гуманитарных наук при решении социально-общественных и профессиональных задач в области материаловедения и технологии материалов
P2	Использовать современное информационное пространство при решении профессиональных задач в области материаловедения и технологии материалов
P3	Разрабатывать, оформлять и использовать техническую документацию, включая нормативные документы по вопросам интеллектуальной собственности в области материаловедения и технологии материалов
P4	Проводить элементарный экономический анализ ресурсов, технологий и производств при решении профессиональных задач в области материаловедения и технологии материалов
P5	Эффективно работать в коллективе на основе принципов толерантности, использовать устную и письменную коммуникации на родном и иностранном языках в мультикультурной среде.
P6	Эффективно выполнять трудовые функции по реализации высокотехнологичных производств материалов и изделий
P7	Проводить комплексную диагностику материалов, процессов и изделий с использованием технических средств измерений, испытательного и производственного оборудования
P8	Готовность к мотивированному саморазвитию, самоорганизации и обучению для обеспечения полноценной социальной и профессиональной деятельности в области материаловедения и технологии материалов
P9	Успешно использовать методы и приемы организации труда, обеспечивающие эффективное, экологически, социально и технически безопасное производство
P10	Использовать принципы производственного менеджмента и управления персоналом в производственной деятельности в области материаловедения и технологии материалов

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**  
федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

---

Инженерная школа новых производственных технологий

Отделение материаловедения

Направление подготовки: *Материаловедение и технологии материалов*

УТВЕРЖДАЮ:  
Руководитель ООП  
\_\_\_\_\_ О.Ю. Ваулина

**ЗАДАНИЕ  
на выполнение выпускной квалификационной работы**

В форме:

Бакалаврской работы
---------------------

Студенту:

Группа	ФИО
154Б71	Юй Яо

Тема работы:

Исследование структуры и свойств керамических тверды хрстворов, стабилизированных энтропией	
Утверждена приказом директора ИШНПТ	Приказ № 57-52/с от 18.02.2021

Срок сдачи студентом выполненной работы:

--	--

**ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:**

<b>Исходные данные к работе :</b>	Объектом исследования данной работы являются энтропийные керамические материалы. Кроме того, рассмотрели и проанализировали соответствующие факторы риска и реальные факторы в рабочем процессе: высокое электромагнитное излучение, недостаточное освещение в рабочей зоне, высокая температура, чрезмерный уровень шума, запыленный воздух, нейропсихологическая перегрузка, пожар и безопасность, и предложили решения и контрмеры, подходящие для промышленной безопасности производства. В соответствии с фактическим процессом исследования рассчитайте производственный цикл продукта, процесс исследования, расчет затрат, возврат и риск возврата инвестиций.
-----------------------------------	--

<b>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</b>	1. Материалы с высокой энтропией 2. Высокоэнтропийные керамические материалы 3. Применение однофазной высокоэнтропийной керамики 4. Материалы и методики 5. Исследование структуры и свойств керамики, стабилизированной энтропией 6. Дополнительные главы: «Финансовый менеджмент, эффективность использования ресурсов и сохранение ресурсов», «Социальная ответственность».
---	---

<b>Перечень графического материала</b>	
--	--

**Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы**

<b>Раздел</b>	<b>Консультант</b>
Финансовый менеджмент	Былкова Татьяна Васильевна, доцент ОСГН, ШБИП
Социальная ответственность	Сечин Александр Иванович, профессор
Обзор литературы	Елена Сергеевна Дедова, доцент отделения материаловедения
Материалы и методика исследования	Елена Сергеевна Дедова, доцент отделения материаловедения
Результаты исследования	Дедова Елена Сергеевна, доцент отделения материаловедения

**Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:**

1. Материалы с высокой энтропией
2. Высокоэнтропийные керамические материалы
3. Применение однофазной высокоэнтропийной керамики
4. Материалы и методики исследований
5. Исследование структуры и свойств керамики, стабилизированной энтропией
6. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение
7. Социальная ответственность

<b>Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику</b>	
---	--

**Задание выдал руководитель:**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
Доцент отделения материаловедения	Дедова Е.С.	К.Т.Н		

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
154Б71	Юй Яо		

## РЕФЕРАТ

Выпускная квалификационная работа 82 с., 20 рис., 19 табл., 37 источника.

Ключевые слова: структуры, керамических твердых растворов, стабилизированные энтропии.

Объектом исследования является керамический твердый раствор (Zr, Hf, Nb)C.

Цель работы - Исследование структуры и свойств керамических твердых растворов, стабилизированных энтропией.

В процессе исследования используются электронный микроскоп , рентгеноструктурный анализ и твердомер ПМТ-3 .

Результатом исследования является то, что структура (Zr, Hf, Nb)C была представлена кубической гранцентрированной решеткой (пространственная группа  $O_h^5 - Fm3m$ ) с параметрами решетки 0,4599 нм. Относительная плотность образцов керамики (Zr,Hf,Nb)C составила 0,87. В процессе получения на полированной поверхности наблюдается остаточная пористость, величина которой не превышает 10 %. Согласно проведенному элементному анализу, на поверхности керамики наблюдалось равномерное распределение элементов. Твердость керамики (Zr, Hf, Nb)C составила 25,7 ГПа. Экспериментальное значение твердости керамики выше величины, рассчитанной по правилу смеси.

Основные конструктивные, технологические и технико-эксплуатационные характеристики: Результаты, полученные в ходе исследовательского периода, могут дать заключения и рекомендации по производству энтропийно стабильных керамических твердых растворов.

Степень внедрения: Результаты будут использованы для разработки устойчивых к энтропии керамических твердых растворов.

Область применения: данный материал может применяться в литий-ионные аккумуляторы, суперконденсаторы, катализ, охрана окружающей среды,

диффузионные барьеры для приложений микроэлектроники, термоэлектрии, электронная керамика, теплоизоляторы, бисовместимые покрытия.

Экономическая эффективность/значимость работы: данный проект является только научной разработкой и началом исследования, то интегральный финансовый показатель разработки рассчитать не представляется возможным. В целом, данный проект является перспективным с точки зрения ресурсопотребления, так как в отличие от аналогов в проекте предусмотрены меньшие затраты на себестоимость будущей продукции за счет использования местных недорогих сырьевых материалов и возможное достижение требуемых физико-механических характеристик.

В будущем планируется изучить структуру и характеристики керамического твердого раствора, стабилизированного энтропией.

## Содержание

Введение.....	8
1. Материалы с высокой энтропией.....	9
2. Высокоэнтропийные керамические материалы.....	12
3. Применение однофазной высокоэнтропийной керамики.....	31
4. Материалы и методики.....	40
5. Исследование структуры и свойств керамики, стабилизированной энтропией.....	41
6. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение.....	48
7. Социальная ответственность.....	67
Заключение.....	77
Список литературы.....	78

## **Введение**

Когда разработка традиционных материалов близка к пределу и не может удовлетворить растущий спрос на новые технологии в различных отраслях промышленности, разработка новых материалов становится особенно важной. Материал с высокой энтропией - это новый тип материала, появившийся в последние годы. Он обладает высокой прочностью, высокой твердостью, хорошей коррозионной стойкостью и отличной стабильностью структуры при высоких температурах.

В 2015 году внимание общественности привлек четкий аргумент о стабильности энтропии - это был первый пример превращения энтропии в однофазную систему [1]. Затем был введен новый материал: оксид, устойчивый к энтропии. В настоящее время высокоэнтропийная керамика расширена за счет включения боридов, карбидов, нитридов, сульфидов и силицидов. Они обладают отличными характеристиками в области тепловой защиты окружающей среды, термоэлектричества, разложения воды, катализа и накопления энергии. Широкий спектр применения. Керамика с высокой энтропией остается однофазной при экстремальных температурах, давлении и химических средах и чрезвычайно стабильна в различных применениях [2].

Данная статья в основном знакомит с типами, структурой и применением разработанной высокоэнтропийной керамики, а также с перспективами их развития.



## 1. Материалы с высокой энтропией

Высокая энтропия - это новая теория конструирования материалов, которая появилась в последние годы. Она стала горячей точкой в области исследования материалов. Ее концепция была первоначально разработана на основе высокоэнтропийных сплавов. С углублением исследований концепция высокой энтропии постепенно распространилась на другие материалы, такие как высокоэнтропийное металлическое стекло, высокоэнтропийную керамику, высокоэнтропийные термоэлектрические материалы, высокоэнтропийные полимеры и т. д [2].

Энтропия, один из параметров, которые характеризуют состояние вещества в термодинамике, и ее физический смысл является мерой степени хаоса в системе.

Энтропия - это мера, предложенная немецкой физикой в середине девятнадцатого века, чтобы прояснить второй закон термодинамики для описания степени хаоса в системе [3]. В определенной системе чем выше энтропия, тем больше степень запутанности. Чем больше хаос, тем более беспокойно. Это противоречит человеческому представлению об упорядоченных правилах. Поэтому исследователи во многих областях исследований не хотят, чтобы изучаемая система имела слишком высокое значение энтропии.

Понятие высокая энтропия было первоначально получено из высокоэнтропийных сплавов, а высокоэнтропийные сплавы были определены в соответствии с величиной энтропии. С точки зрения энтропии, когда  $S_{mix} \geq 1,61R$  (то есть количество компонентов  $N \geq 5$ ), это можно назвать высокая энтропия [4]. Для керамики и других неметаллических материалов концепция высокой энтропии расширяется, чтобы иметь 5 или более ионов в одной и той же подрешетке. Определение высокой энтропии все еще улучшается и развивается, но через увеличение количества компонентов для увеличения энтропии конфигурации системы и создания различных неожиданных

высокоэнтропийных эффектов является основной целью исследования высокоэнтропийных материалов.

*Высокая энтропия эффект [5]*

Основные свойства различных компонентов и взаимодействие между ними делают материалы с высокой энтропией более сложными. Регулируя относительное содержание каждого компонента, можно регулировать свойства материалов с высокой энтропией. Например, добавление легких элементов может снизить плотность, а добавление Al и Si может улучшить стойкость к окислению. Однако стоит изучить, что характеристики многокомпонентного твердого раствора иногда не являются просто суперпозицией нескольких отдельных компонентов, они могут возрастать нелинейно и превышать сумму характеристик всех компонентов, то есть синергетическое увеличение нескольких компонентов эффект.

*Расчет энтропии смешения эквимолярной системы.*

При исследовании существующих материалов с высокой энтропией исследователи в основном судят о том, является ли определенный материал материалом с высокой энтропией, по уровню энтропии смешения (также называемой конфигурационной энтропией); а материал с энтропией смешения менее  $0,69R$  называется материалом с низкой энтропией. Материал с  $0,69R \sim 1,61R$  называется материалом со средней энтропией, а материал с  $R$  больше  $1,61$  является материалом с высокой энтропией [6]. Среди них  $R$  - мольная доля газа, а именно  $8,31 \text{ Дж} \cdot \text{К}^{-1} \text{ моль}^{-1}$ . Энтропия смешения обычно выражается  $\Delta S_{\text{mix}}$ , которую можно рассчитать по формуле (1.1) [7].

$$\Delta S_{\text{mix}} = k \ln \left( \frac{N!}{n_0! n_1! \dots n_r!} \right) \quad (1.1)$$

$k$  - постоянная Больцмана,  $N$  - общее количество атомов в исследуемой системе,  $n_i$  ( $i = 0, 1, 2, 3 \dots n$ ) - количество атомов, содержащихся в каждом компоненте системы, и  $n_1 + n_2 + \dots + n_r = N$ . Когда  $N$  достаточно велико, согласно формуле Стирлинга:

$$\ln\left(\frac{N!}{n_0!n_1!\dots n_r!}\right) = -N \left(\sum_{i=1}^r \frac{n_i}{N} \ln n_i - \ln N\right) \quad (1.2)$$

Если пусть  $a_i = n_i / N$ , тогда  $a_i > 0$  и верхний  $\sum a_i = 1$ , указанная выше смешанная энтропия может быть выражена как:

$$\Delta S_{mix} = -Nk \sum_{i=1}^r a_i \ln a_i \quad (1.3)$$

То есть в системе эквимольярных долей получается максимальное значение  $Nk \ln r$ . Таким образом, формула для расчета энтропии перемешивания вещества, состоящего из основных компонентов  $r$ , может быть преобразована в:

$$\Delta S_{mix} = -R \sum_{i=1}^r a_i \ln a_i \quad (1.4)$$

Исходя из приведенной выше формулы, смешанная энтропия пятикомпонентного вещества максимальна, когда мольная доля каждого компонента равна [6].

Значение смешанной энтропии в настоящее время является эталонным значением для оценки того, является ли материал материалом с высокой энтропией. Это также основная причина того, почему определение ранних высокоэнтропийных сплавов и других высокоэнтропийных материалов содержало выражение равная мольная доля.

## 2. Высокоэнтропийные керамические материалы

Керамические материалы с высокой энтропией обычно относятся к многокомпонентному твердому раствору, состоящему из 5 или более керамических компонентов. Благодаря новому эффекту высокой энтропии и отличным характеристикам, он стал одной из горячих точек исследований в области керамики в последние годы [8]. Однофазная высокоэнтропийная керамика в основном включает сплавы каменной соли, оксиды, бориды, карбиды, нитриды и силициды. Все эти соединения имеют высокосимметричную структуру, как показано на рисунке 2.1.

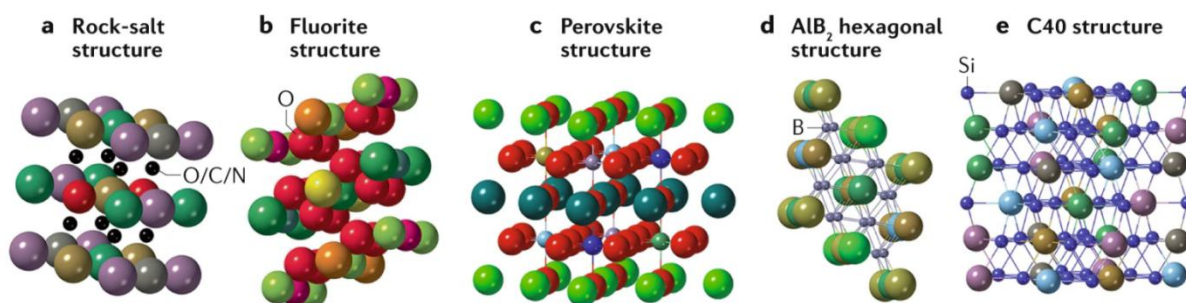


Рисунок 2.1 - Сильно симметричная структура высокоэнтропийной керамики. Структуры и составы включают структуру каменной соли (оксиды, карбиды, нитриды) (часть a), структуру флюорита (оксиды) (часть b), структуру перовскита (оксиды) (часть c), гексагональную структуру  $AlB_2$  (бориды). (часть d) и структура C40 (силициды) (часть e) [9].

### *Высокоэнтропийные керамические оксидные материалы*

В 2015 году Rost, Maria из Университета штата Северная Каролина, Curtarolo из Университета Дьюка и другие впервые сообщили о высокоэнтропийном керамическом материале [1]. Они использовали  $MgO$ ,  $NiO$ ,  $CoO$ ,  $CuO$  и  $ZnO$  в качестве исходного сырья в дополнение к  $CuO$ , за исключением  $ZnO$ , все три других оксида представляют собой структуры каменной соли. Пять оксидов однородно смешивают, нагревают на воздухе и выдерживают при  $875\text{ }^{\circ}C$  в течение 12 часов с образованием однофазной  $(MgNiCoCuZn)O$  высокоэнтропийной керамики. Исследование показало, что при удалении любого компонента образцы, полученные в одинаковых условиях,

имеют фазовое разделение, то есть любая 4-компонентная система не может образовывать единую фазу при тех же условиях термообработки (рис 2.2 а), выше Конфигурационная энтропия будет больше способствовать образованию одной фазы (рис 2.2 б); соотношение количества веществ различных компонентов влияет на температуру образования высокоэнтропийных оксидов, когда эти элементы равны количеству веществ (когда оба равны 0,2), требуемая температура является самой низкой (рис 2.2 с ~ г); фазовый состав продукта также демонстрирует обратимые характеристики с изменениями температуры. Высокоэнтропийная керамика, образовавшая одну фазу, повторно нагревается до 750 °С, и они будут повторно разделены. После повторного нагревания до 1000 °С он продолжит образовывать одну фазу, что является обратимым фазовым переходом, вызванным энтропией.

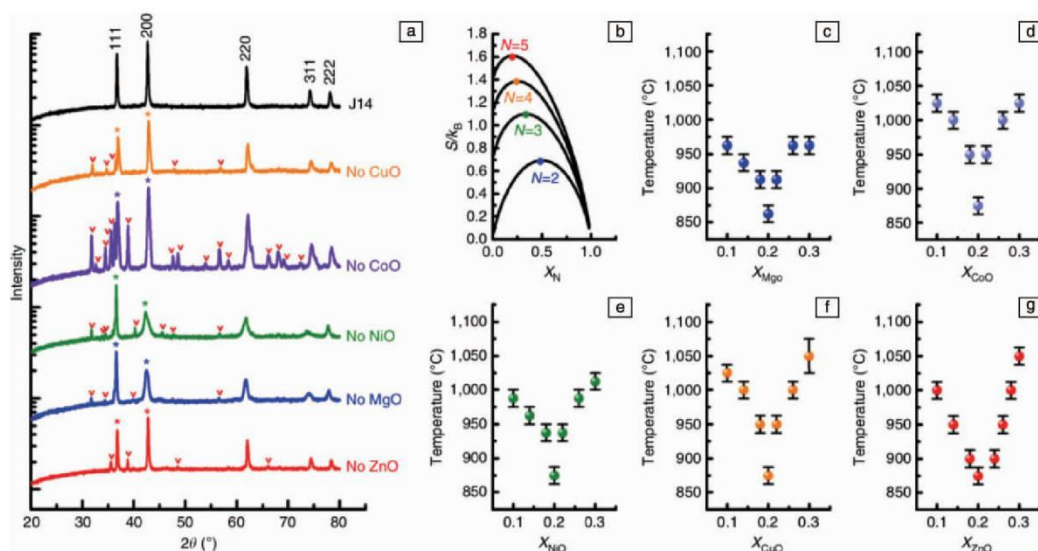


Рисунок 2.2 - Рентгенограммы серии композитов после удаления любой группы элементов из исходных компонентов (звезды представляют собой характерные пики структуры каменной соли, а сердечки представляют собой характерные пики других кристаллических структур) (а); N-членная конфигурация твердого раствора Изменение энтропии в зависимости от состава (б); изменение температуры фазового перехода в зависимости от содержания. Когда содержание каждого компонента составляет 0,2, температура фазового перехода самая низкая (энтропия конфигурации самая высокая) (с ~ г) [1]

Для многокомпонентных систем, чем больше компонентов и чем ближе их содержание, тем выше энтропия конфигурации. Вышеупомянутые явления показывают, что увеличение конфигурационной энтропии может способствовать образованию соединений. Их работа впервые распространила концепцию высокой энтропии со сплавов на другие материалы, а затем исследования высокоэнтропийной керамики постепенно расширились. В настоящее время исследования высокоэнтропийной оксидной керамики можно резюмировать в двух аспектах: один - продолжить изучение структурных характеристик керамики  $(\text{MgNiCoCuZn})\text{O}$ , оптимизировать методы ее получения и изучить ее новые свойства; второй - изучить новые свойства.

Углубленное понимание структуры высокоэнтропийной керамики является основой для понимания ее различных особых свойств. Rost и др. Охарактеризовали структуру  $(\text{MgNiCoCuZn})\text{O}$  с помощью передовых методов испытаний, таких как спектроскопия тонкой структуры поглощения рентгеновских лучей (EXAFS) и электронная микроскопия (Cs-STEM). Все результаты подтвердили, что распределение пяти катионов в атомном масштабе является случайным и однородным [1], но разные катионы и ионы кислорода имеют разную длину связи между ними, а вблизи иона Cu наблюдается большое искажение решетки [9]. В 2018 г, Rák и др [10] использовали первые принципы для расчета координации и электронной структуры атомов вблизи ионов Cu. Вычислив длину связи Cu-O и проанализировав плотность электронных состояний, они обнаружили, что есть ян-теллеровское искажение вблизи октаэдра Cu-O. Исследование Berardan и др [11] также подтвердило, что Cu оказывает важное влияние на микроструктуру  $(\text{MgNiCoCuZn})\text{O}$ . Увеличение содержания Cu изменяет окружающую координационную среду, и продукт с большей вероятностью будет отклоняться от идеальной породолевой состав.

Первоначальный метод приготовления высокоэнтропийной оксидной керамики основан на использовании смешанных порошков различных оксидов в качестве сырья, а твердые растворы образуются за счет высокотемпературной диффузии. С тех пор для приготовления порошка  $(\text{MgNiCoCuZn})\text{O}$  и керамики

также использовались некоторые новые методы. Например: метод пиролиза распылением (NSP), метод пиролиза распылением пламенем (FSP), метод обратного соосаждения (RCP) и т. Д.

Из-за своей локальной неупорядоченной структуры тепловым, электрическим, магнитным и другим функциональным свойствам  $(\text{MgNiCoCuZn})\text{O}$  уделяется больше внимания. В 2018 году Braun [12] обнаружил, что оксидная керамика с высокой энтропией с таким же количеством материала имеет чрезвычайно низкую теплопроводность при сохранении высокого модуля упругости. Высокоэнтропийная керамика на основе  $(\text{MgNiCoCuZn})\text{O}$ , обнаруженная Berardan и др, имеет огромную диэлектрическую проницаемость [13], которая демонстрирует сверхбыструю скорость прохождения ионов лития и высокую скорость прохождения ионов натрия во время тестов спектроскопии электрохимического импеданса [14].  $(\text{MgNiCoCuZn})\text{O}$  также можно использовать в качестве катализатора окисления  $\text{CO}$ .

#### *Высокоэнтропийный боридные керамические материалы*

Исследования высокоэнтропийной боридной керамики в основном сосредоточены на диборидах ( $\text{MB}_2$ ) переходных металлов IVB и VB групп. Большинство этих боридов имеют гексагональную структуру типа  $\text{AlB}_2$ , то есть атомы В образуют слоистую структуру, подобную графиту. Атомы металла разбросаны между слоями. Именно благодаря сильным ковалентным характеристикам кольца В-В и связи М-В  $\text{MB}_2$  имеет более высокую температуру плавления, твердость, прочность, термостабильность и проводимость, поэтому его можно применять для материалов брони. Аэрокосмические материалы, инструментальные материалы и другие области [15]. Теория высокой энтропии предоставляет больше возможностей для разработки новой боридной керамики. Конструкция каждого компонента позволяет формировать различные многокомпонентные твердые растворы, что значительно расширяет виды сверхвысокотемпературной керамики и позволяет более точно контролировать их свойства.

В 2016 году команда Gild использовала высокоэнергетическую шаровую мельницу и искровое плазменное спекание для производства семи эквимольных пятикомпонентных диборидов металлов [16]. Шесть из них, в том числе  $(\text{Hf}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ti}_{0.2})\text{B}_2$ ,  $(\text{Hf}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{Mo}_{0.2}\text{Ti}_{0.2})\text{B}_2$ ,  $(\text{Hf}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Mo}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ti}_{0.2})\text{B}_2$ ,  $(\text{Hf}_{0.2}\text{Mo}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ti}_{0.2})\text{B}_2$ ,  $(\text{Mo}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ti}_{0.2})\text{B}_2$  и  $(\text{Hf}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{Cr}_{0.2}\text{Ti}_{0.2})\text{B}_2$ . Эти материалы представляют собой новый тип ультравысокотемпературной керамики (УНТС) и новый тип высокоэнтропийных материалов. Это открытие значительно расширяет знания о высокоэнтропийных материалах не только потому, что это первый раз, когда синтезируют кристаллическую высокоэнтропийную неоксидную керамику (особенно бориды), но также потому, что эти высокоэнтропийные дибориды металлов имеют уникальную слоистую форму. состав. Гексагональная кристаллическая структура с чередующимися жесткими двумерными (2D) сетками из бора и высокоэнтропийными 2D слоями катионов металлов (по сути, тип квази-2D высокоэнтропийного материала), как схематично показано на рисунке 2.3.

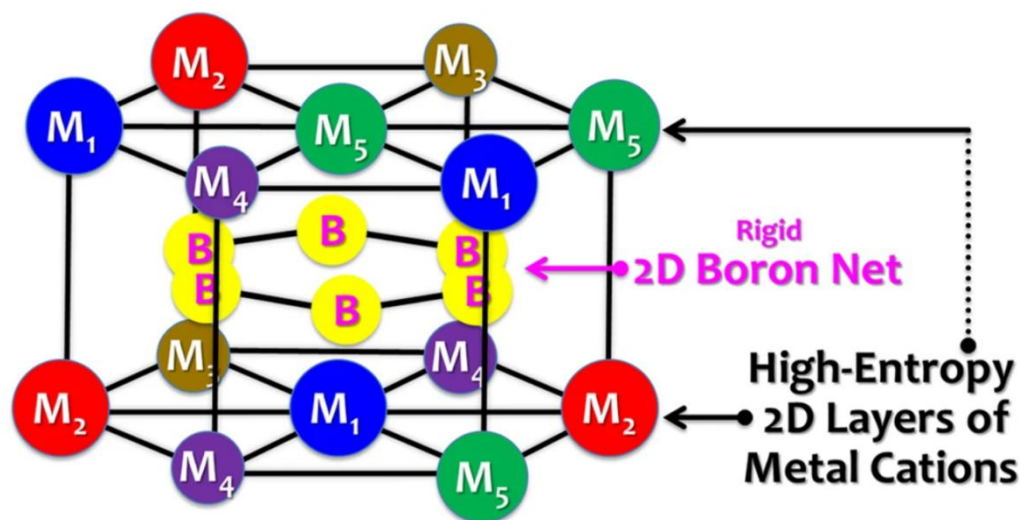


Рисунок 2.3 - Схематическая диаграмма атомной структуры высокоэнтропийных диборидов металлов. Здесь  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$ ,  $M_4$  и  $M_5$  представляют пять различных переходных металлов (выбранных из Zr, Hf, Ti, Ta, Nb, W и Mo). Этот новый высокоэнтропийный материал и новый УНТС имеют уникальную слоистую гексагональную кристаллическую структуру с



чередующимися жесткими двумерными борными сетками и высокоэнтропийными двумерными слоями катионов металлов (по сути, тип квази-двумерного высокоэнтропийного материала). связи и ковалентные связи (МВ).

Основное содержание их исследовательской работы:

(1)  $WB_2$  нестабилен при комнатной температуре, и  $MoB_2$  также находится в метастабильном состоянии при комнатной температуре. Посредством многокомпонентного твердого раствора W и Mo могут быть стабилизированы в структуре  $AlB_2$ , которая аналогична энтропии в оксидной керамике. Стабилизирующий эффект [17];

(2) В высокоэнтропийных сплавах разница в среднем атомном радиусе может использоваться для прогнозирования возможности образования однофазного твердого раствора, в то время как для керамических материалов они расширили этот метод, чтобы использовать разницу в постоянных решетки, чтобы предсказать, может ли образоваться однофазный твердый раствор. Чем больше разница в средних значениях постоянной решетки ( $\delta$ ), тем труднее получить однофазный твердый раствор;

(3) Посредством наблюдения Cs-STEM было обнаружено, что распределение каждого атома металла в бориде на атомном уровне также является случайным и однородным;

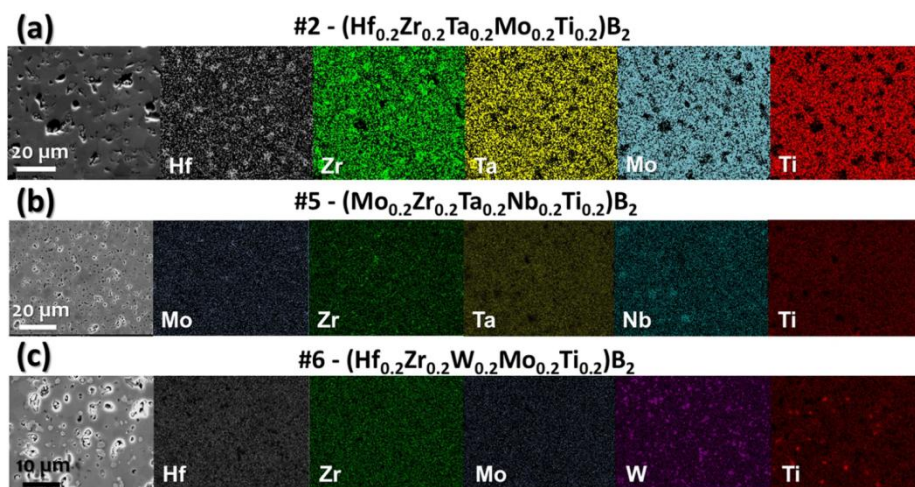


Рисунок 2.4 - Поперечный СЭМ изображения трех отобранных образцов после SPS и соответствующих диаграмм состава EDX.

(4) Твердость высокоэнтропийной керамики, как правило, выше, чем среднее значение для каждой однокомпонентной керамики (рис 2.5), а сопротивление окислению также лучше, чем среднее значение, равное пяти.

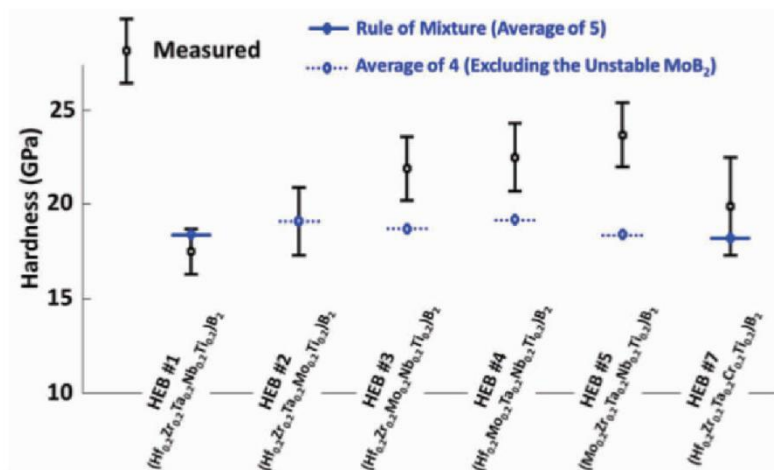


Рисунок 2.5 -Твердость шести однофазных высокоэнтропийных диборидов металлов, которая выше, чем средние значения твердости, измеренные для отдельных диборидов металлов [18]

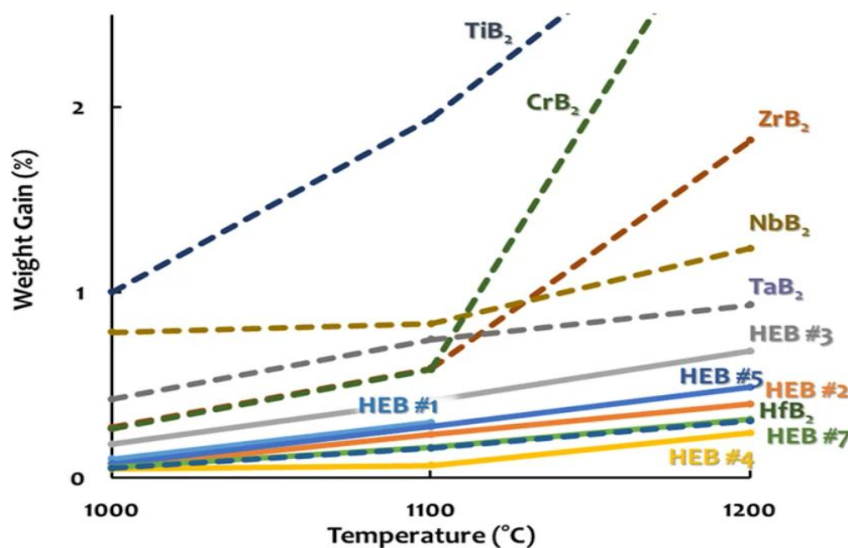


Рисунок 2.6 - Снимок относительной окислительной способности различных высокоэнтропийных и индивидуальных диборидов металлов, изготовленных и испытанных в одинаковых условиях. На этом рисунке сплошная линия представляет диборид металла с высокой энтропией, а пунктирная линия представляет собой единственный (обычный) диборид металла, полученный тем же производственным путем [19].

### *Получение высокоэнтروпийной боридной керамики*

Боридная керамика - перспективный высокотемпературный конструкционный материал, хорошие механические свойства конструкционной керамики зависят от степени уплотнения. Борид имеет сверхвысокую температуру плавления и характеристики сильной ковалентной связи, а порошок исходного материала также имеет много примесей, поэтому трудно получить боридную керамику высокой плотности с помощью обычных методов спекания. Команда Luo Jian непосредственно подвергала 5 видов коммерческих порошков боридов высокоэнергетической шаровой мельнице, а затем подвергала их искровому плазменному спеканию. Относительная плотность полученных образцов была очень низкой, все между 92 % и 93 %, и присутствовали примесные фазы оксидов. Значительно снижают различные свойства боридной керамики [20]. В процессе изготовления однофазной боридной керамики обычно добавляется определенная объемная доля SiC, которая может способствовать спеканию порошка, а когда SiC используется в качестве второй фазы, это также улучшит характеристики керамики [21]. Но для высокоэнтропийной боридной керамики добавление второй фазы повлияет на оценку ее собственных характеристик. Следовательно, для получения боридной керамики высокой плотности, высокой чистоты и высокой энтропии более подходящим методом является получение высококачественного порошка.

Tallarita и др [22] использовали в качестве сырья порошок металлических элементов и порошок аморфного бора, сначала приготовили порошок  $(\text{Ti}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{-Mo}_{0.2}\text{Ta}_{0.2})\text{B}_2$  методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (SHS), а затем с этим порошком для последующего спекания относительная плотность конечного образца может достигать 92,4 %. Хотя увеличение плотности образца ограничено, время высокоэнергетической шаровой мельницы экономится, а примеси оксидов не обнаруживаются.

Guo Weimin из Технологического университета Гуандун и др [23] использовали оксиды металлов и порошок аморфного бора в качестве сырья,

используя метод термического восстановления бора при 1600 °С, синтезированные субмикронные  $(\text{Ti}_{0,2}\text{Cr}_{0,2}\text{Zr}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}\text{Ta}_{0,2})\text{B}_2$ ,  $(\text{Ti}_{0,2}\text{Zr}_{0,2}\text{Nb}_{0,2}\text{Mo}_{0,2}\text{Hf}_{0,2})\text{B}_2$ ,  $(\text{Ti}_{0,2}\text{Nb}_{0,2}\text{Mo}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}\text{Ta}_{0,2})\text{B}_2$  и другие порошки, а затем использовать порошок для спекания и, наконец, получить относительную плотность твердость высокоэнтропийной боридной керамики до 99,2 % и 97,7 % и 95,0 % достигает 25,9–28,3 ГПа, но конечный керамический образец содержит 2,4–7,2 % оксидных примесей.

Команда Fu Zhengyi из Уханьского технологического университета также провела некоторые исследования высокоэнтропийной боридной керамики [24]. Они использовали  $\text{B}_4\text{C}$  для восстановления оксидов металлов. Во-первых, они получили мелкодисперсную, высокоэнтропийную боридную керамику путем быстрого полевого синтеза при 1700 °С в течение 10 минут. Порошок бориды высокой чистоты имеет содержание кислорода только 0,64 % (массовая доля) и содержание углерода 0,04 % (массовая доля).

#### *Механические свойства высокоэнтропийной боридной керамики*

В настоящее время исследования механических свойств высокоэнтропийной боридной керамики в основном сосредоточены на твердости и вязкости разрушения.

Composition	Sintering temperature / °C	Relative density / %	Toughness / $1 \text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$	Hardness / GPa	Ref.
$1\text{Ti}_{0,2}\text{Zr}_{0,2}\text{Nb}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}\text{Ta}_{0,2}2\text{B}_2$	2000	92.4	—	$17.5 \pm 1.2$ 1HV ~ I2	[13]
$1\text{Ti}_{0,2}\text{Zr}_{0,2}\text{Mo}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}\text{Ta}_{0,2}2\text{B}_2$	2000	92.4	—	$19.1 \pm 1.8$ 1HV ~ I2	[13]
$1\text{Ti}_{0,2}\text{Zr}_{0,2}\text{Nb}_{0,2}\text{Mo}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}2\text{B}_2$	2000	92.3	—	$21.9 \pm 1.7$ 1HV ~ I2	[13]
$1\text{Ti}_{0,2}\text{Nb}_{0,2}\text{Mo}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}\text{Ta}_{0,2}2\text{B}_2$	2000	92.2	—	$22.5 \pm 1.7$ 1HV ~ I2	[13]
$1\text{Ti}_{0,2}\text{Nb}_{0,2}\text{Zr}_{0,2}\text{Mo}_{0,2}\text{Ta}_{0,2}2\text{B}_2$	2000	92.1	—	$23.7 \pm 1.7$ 1HV ~ I2	[13]
$1\text{Ti}_{0,2}\text{Cr}_{0,2}\text{Zr}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}\text{Ta}_{0,2}2\text{B}_2$	2000	92.2	—	$19.9 \pm 2.6$ 1HV ~ I2	[13]
$1\text{Ti}_{0,2}\text{Cr}_{0,2}\text{Zr}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}\text{Ta}_{0,2}2\text{B}_2$	2000	99.2	—	$28.3 \pm 1.6$ 1HV0.22	[60]
$1\text{Ti}_{0,2}\text{Zr}_{0,2}\text{Nb}_{0,2}\text{Mo}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}2\text{B}_2$	2000	97.7	—	$26.3 \pm 0.7$ 1HV0.22	[60]
$1\text{Ti}_{0,2}\text{Nb}_{0,2}\text{Mo}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}\text{Ta}_{0,2}2\text{B}_2$	2000	96.3	—	$25.9 \pm 1.1$ 1HV0.22	[60]
$1\text{Ti}_{0,2}\text{Zr}_{0,2}\text{Nb}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}\text{Ta}_{0,2}2\text{B}_2$	2000	98.1	$4.06 \pm 0.35$	$21.7 \pm 1.1$ 1HV0.22	[61]
$1\text{Ti}_{0,2}\text{Zr}_{0,2}\text{Nb}_{0,2}\text{Mo}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}2\text{B}_2$	2000	98.5	$3.64 \pm 0.36$	$26.3 \pm 1.8$ 1HV0.22	[61]
$1\text{Ti}_{0,2}\text{Nb}_{0,2}\text{Mo}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}\text{Ta}_{0,2}2\text{B}_2$	2000	96	$4.47 \pm 0.40$	$27.0 \pm 0.4$ 1HV0.22	[61]
$1\text{Ti}_{0,2}\text{Zr}_{0,2}\text{Nb}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}\text{Ta}_{0,2}2\text{B}_2$	2000	94.4	$2.83 \pm 0.15$	$25.6 \pm 0.8$ 1HV0.22	[62]
$1\text{Ti}_{0,2}\text{Zr}_{0,2}\text{Nb}_{0,2}\text{Hf}_{0,2}\text{Ta}_{0,2}2\text{B}_2$	2050	97.9	—	$26.8 \pm 1.8$ 1HV0.22	[62]

Рисунок 2.7 - Механические свойства высокоэнтропийной боридной керамики

Видно, что значения твердости образцов различных систем в основном находятся в диапазоне 20-30 ГПа, а вязкость разрушения составляет 2,8-4 МПа · м<sup>1/2</sup>, что эквивалентно однокомпонентной боридной керамике. Это означает, что высокоэнтропийная боридная керамика может сохранять хорошие механические свойства, регулируя другие свойства, такие как тепло и электричество, путем изменения состава. Кроме того, твердость керамики связана с методами подготовки, испытаний и другими методами. Значения, указанные в различных документах, могут сильно различаться. Однако в одних и тех же условиях очевиден закон о том, что твердость высокоэнтропийной боридной керамики превышает среднее значение каждого компонента [20-25].

#### *Керамические материалы с высокоэнтропийным карбидом*

Исследования высокоэнтропийной карбидной керамики в настоящее время в основном сосредоточены на твердых растворах карбидов переходных металлов IVB и VB групп. Эти карбиды имеют структуру каменной соли и, как и бориды, обладают прочными характеристиками ковалентной связи и высокими температурами плавления и могут использоваться в различных экстремальных условиях. В кристалле растворены различные ионы металлов, что также значительно расширяет типы карбидной керамики.

#### *Структура высокоэнтропийной карбидной керамики*

В 2018 году Castle и др [26] впервые получили высокочистую и высокоплотную четырехкомпонентную карбидную керамику (TiZrHfTa)C и (ZrNbHfTa)C. Они обнаружили, что полученная (TiZrHfTa)C, что имеет неоднородную структуру на некоторых участках, тогда как образец (ZrNbHfTa)C очень однороден. Они использовали технологию дифракции обратного рассеяния электронов (EBSD) [27] и технологию Cs-STEM, чтобы подтвердить, что образец (ZrNbHfTa)C имеет однородный состав на микроскопическом уровне и нет явной сегрегации на атомном уровне (рис 2.8), аналогичные результаты есть и в исследовании [18,27].

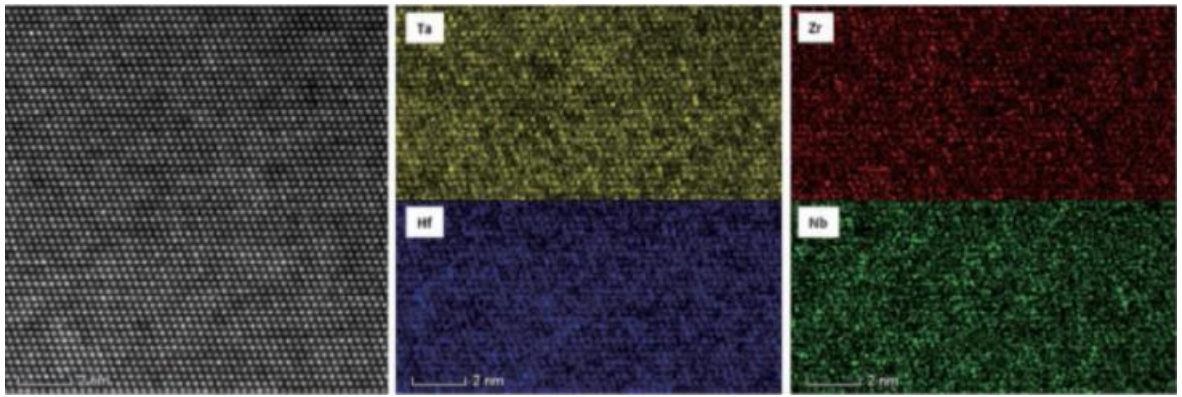


Рисунок 2.8 - микрофотографии HAADF STEM и изображения EDS с атомарным разрешением вдоль оси зоны [011] ( $Fm-3m$ ), показывающие наиболее случайное распределение составляющих элементов.

Может ли он образовывать однофазный твердый раствор - еще один ключевой вопрос в изучении высокоэнтропийных структур. Разница в постоянной решетки может в определенной степени предсказать возможность образования однофазного твердого раствора [20]. Однако для боридов и карбидов Mo и W они не подходят из-за различных типов кристаллов.

Sarker и др [4] предложили теоретическую модель для расчета способности к образованию энтропии (EFA), которая используется для прогнозирования того, могут ли многоэлементные карбиды образовывать однофазный твердый раствор. Чем больше значение EFA, тем легче образовать твердый раствор. Они рассчитали 56 пятиэлементных карбидов с высокой энтропией и синтезировали из них 9. Они обнаружили, что экспериментальные результаты в основном соответствовали теоретическим предсказаниям, что значительно сократило время эксперимента и имеет большое значение для предсказания фазообразования многоэлементных карбидов.

Harrington и др [27] изучали фазовую стабильность высокоэнтропийных карбидов. Карбиды группы IVB ( $Mo_2C$  и  $W_2C$ ) не являются структурами каменной соли, но W или Mo могут стабильно существовать в твердых растворах высокоэнтропийных карбидов, то есть конфигурационная энтропия. Увеличение может улучшить фазовую стабильность; когда система содержит как W, так и Mo, произойдет разделение фаз, то есть энтропия конфигурации

недостаточна, чтобы сделать ее стабильной. Кроме того, однофазный  $(V_{0.2}Nb_{0.2}Mo_{0.2}Ta_{0.2}W_{0.2})C$  может существовать стабильно, то есть в этой системе энтропии достаточно для преодоления нестабильности, вызванной энтальпией смешения (положительное значение), аналогично Упомянутый ранее энтропийно стабильный оксид.

#### *Получение высокоэнтропийной карбидной керамики*

Подобно боридной керамике спекание карбидной керамики также затруднено, а требуемая температура спекания даже выше, чем у боридной керамики, как в случае высокоэнтропийных карбидов. В ранних исследованиях непосредственно использовалось большинство промышленных порошков карбидов, то есть высокоэнтропийная керамика была получена твердым раствором карбидов. Это самый простой метод получения высокоэнтропийной керамики, но в промышленных порошках слишком много примесей кислорода, и в конечном итоге получить плотную керамику сложно.

Yan и др [28] получили керамику  $(Ti_{0.2}Zr_{0.2}Nb_{0.2}Hf_{0.2}Ta_{0.2})C$  при 2000 °C с относительной плотностью всего 93 %. Керамика  $(Ti_{0.25}V_{0.25}Zr_{0.25}Nb_{0.25})C$ , полученная Chu Yanhui и др [29] при 2100 °C, имеет относительную плотность только 95,1 %. Поэтому использование высококачественного порошка или специального метода спекания (реакционного спекания) особенно важно.

Feng и др [30] получили порошок  $(Ti_{0.2}Nb_{0.2}Zr_{0.2}Hf_{0.2}Ta_{0.2})C$  непосредственно карботермическим восстановлением различных оксидов переходных металлов, который имеет низкое содержание кислорода (массовая доля 0,2 %). И более мелкий размер зерна (550 нм). Хотя о работе с керамикой не сообщалось, можно ожидать, что порошок будет иметь хорошую спекающую способность.

Группа Zhang Guojun из Университета Дунхуа [31] сообщила, что однофазная керамика  $(TiZrNbTaW)C$  может быть получена тремя различными методами: совместным твердым раствором карбидов, спеканием в реакции элементов и спеканием восстановления оксидов. Из-за высокого содержания

кислорода в порошке относительная плотность образца, полученного путем взаимного твердого раствора карбидов, низкая (95,7 %); из-за более крупного металлического порошка распределение элементов в образце, полученном реакционным спеканием элементов, очень неравномерное; восстановление оксида С помощью этого метода можно также получить относительно плотную керамику, но из-за более высокой температуры реакции  $ZrO_2$  и С, хотя полученный продукт является однофазным, в распределении Zr появляется очевидная сегрегация.

#### *Свойства высокоэнтропийной карбидной керамики*

В настоящее время обнаружено, что особые свойства высокоэнтропийных карбидов включают твердость и модуль упругости, превышающие среднее значение каждого компонента, и более низкую теплопроводность, чем все компоненты.

Саркер и др [4] измерили модуль упругости и твердость шести различных высокоэнтропийных карбидов, которые все превышают среднее значение каждого компонента, что может быть связано с беспорядком кристаллической решетки. Идеальная упорядоченная решетка считается дислокационным волноводом, подверженным однородному сопротивлению, а распространение дислокации не подвержено никакому отражению или дисперсии. Неупорядоченная кристаллическая решетка изменяет это явление. Неравномерное сопротивление растяжению дислокаций вызывает отражение и дисперсию энергии. Макроскопически сопротивляется пластической деформации, вызванной дислокацией. Кроме того, еще одной важной причиной может быть упрочнение твердого раствора, то есть искажение решетки препятствует движению дислокаций или изменяет их систему скольжения.

Аналогичные результаты имеют и эксперименты Harrington и др [27], которые считают, что улучшение механических свойств высокоэнтропийной карбидной керамики связано не только с упрочнением твердого раствора, но и с механизмом механики деформации, на который влияет сложная электронная структура твердого раствора. Кроме того, улучшение механических свойств



твердого раствора, по-видимому, связано только с высокой энтропией, а энтропийная стабильность не требуется. Исследователи обнаружили, что механические свойства высокоэнтропийной карбидной керамики улучшились. В рисунок 2.9 перечислены механические свойства высокоэнтропийной карбидной керамики, полученные в различных исследованиях [4,26-29,31,32].

Composition	Sintering temperature / °C	Relative density / %	Young's modulus / GPa	Toughness / $\text{MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$	Hardness / GPa	Ref.
$1\text{Nb}_{0.25}\text{Zr}_{0.25}\text{Hf}_{0.25}\text{Ta}_{0.25}2\text{C}$	2300	99	$598 \pm 15$	—	$36.1 \pm 1.6$	[14]
$1\text{V}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Mo}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{W}_{0.2}2\text{C}$	2200	—	$533 \pm 32$	—	$27 \pm 3$	[18]
$1\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}2\text{C}$	2200	—	$443 \pm 40$	—	$32 \pm 2$	[18]
$1\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}2\text{C}$	2200	—	$503 \pm 40$	—	$29 \pm 3$	[18]
$1\text{Ti}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{W}_{0.2}2\text{C}$	2200	—	$483 \pm 24$	—	$31 \pm 2$	[18]
$1\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{W}_{0.2}2\text{C}$	2200	—	$485 \pm 36$	—	$28 \pm 2$	[18]
$1\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{W}_{0.2}2\text{C}$	2200	—	$473 \pm 26$	—	$33 \pm 2$	[18]
$1\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}2\text{C}$	2000	93	479	—	15 HV12	[65]
$1\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}2\text{C}$	2200	—	$443 \pm 40$	—	$32 \pm 2$	[64]
$1\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}2\text{C}$	2200	—	$503 \pm 30$	—	$29 \pm 3$	[64]
$1\text{Ti}_{0.2}\text{V}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{W}_{0.2}2\text{C}$	2200	—	$485 \pm 36$	—	$28 \pm 2$	[64]
$1\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{W}_{0.2}2\text{C}$	2200	—	$473 \pm 26$	—	$33 \pm 2$	[64]
$1\text{Ti}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{W}_{0.2}2\text{C}$	2200	—	$483 \pm 24$	—	$31 \pm 2$	[64]

Рисунок 2.9 -Механические свойства высокоэнтропийной карбидной керамики

#### *Керамические материалы с высокоэнтропийным нитридом*

Помимо вышеупомянутых обычных оксидов, боридов и карбидов, существуют также отчеты об исследованиях высокоэнтропийных нитридов, силицидов и термоэлектрических материалов. Среди них нитрид является одним из первых материалов с высокой энтропией. Команда Ye Junwei [25] задействовала высокоэнтропийный нитрид в начальных исследованиях тонкопленочных материалов из высокоэнтропийных сплавов, которые показали отличные механические свойства в качестве тонкопленочных материалов. В 2018 году группа Jin [32] приготовила порошок  $(\text{VCrZrNbMo})\text{N}$ . Они использовали хлорид металла и мочевины в качестве прекурсоров для синтеза нитридного порошка при  $800\text{ }^\circ\text{C}$ , показав отличные электрохимические

характеристики. До 2020 года команда Dmitry сообщила о новом трехэтапном методе получения массивных высокоэнтропийных нитридов.

Первый этап подготовки позволяет нам производить композитные частицы, содержащие все пять металлов, смешанные на субмикронном слое металлической композиции (рис 2.10 a, g). Из-за явления холодной сварки в процессе шлифования в основном теле каждой частицы образуется тонкий металлический слой толщиной 10-100 нм, что обеспечивает высокую степень однородности их перемешивания. Анализ EDS показывает, что соотношение металлов остается эквимольным. Кроме того, измельчение на относительно низкой скорости (200 об / мин) и высоком давлении чистого аргона позволяет получить порошок с низкой концентрацией примесей. Спектр XRD полученного таким образом порошка (рис 2.10 d) показывает, что даже после 10 часов механической обработки все металлы все еще сохраняют свою кристалличность.

Целью второго этапа подготовки является введение в систему азота в виде нитридов металлов и твердых растворов азота. Эта задача решается за счет использования энергосберегающих методов синтеза сгорания. Общая продолжительность процесса азотирования составляет ~ 5 с. Видно, что горение таких активных металлических частиц в атмосфере азота приводит к образованию множества нитридных фаз (рис 2.10 b, e), в которых обнаруживается предсказанная фаза  $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{N}_{1-x}\text{TN}$ . Микроструктура внутри композитных частиц становится более крупной (рис 2.10 b), а размер зерна находится в диапазоне 0,5–1 мкм. В продукте сгорания также присутствует фаза смешанного оксида гафния и циркония (рис 2.10 h), что может быть связано с примесями кислорода в исходном порошке и механически активированной смеси, находящейся на воздухе во время сгорания прессованных сырых гранул.

На третьем этапе синтезированный SPS частиц композиционного нитрида металла используется для производства объемной керамики. После выполнения SPS в оптимизированных условиях эксперимента измеренная

относительная плотность керамики составляет 96,6 % от теоретического максимума. Полученная фаза HfN характеризуется узким гранулометрическим составом (10-16 мкм) и полиэдрическими кристаллами, в основном гексагональными (рис 2.10 с). Кроме того, в спеченном образце не было обнаружено фазы  $\text{Hf}_{0,5}\text{Zr}_{0,5}\text{N}_{1-x}\text{TN}$  (рис 2.10 f, i), что указывает на то, что она была успешно преобразована в HfN. Рассчитайте постоянную решетки  $a=0,4443$  на основе рентгенограммы HfN (рис 2.10 f). Согласно результатам анализа XRD и EDS,  $\sim 4,2$  мол %  $(\text{Hf}, \text{Zr})\text{O}_x$  фазы образуется во время синтеза сгорания и остается в спеченной керамике (рис 2.10 f, i). Количество оксида относительно невелико, и мы думаем, что его можно удалить, применив дополнительные технические меры или регулируя технологический процесс.

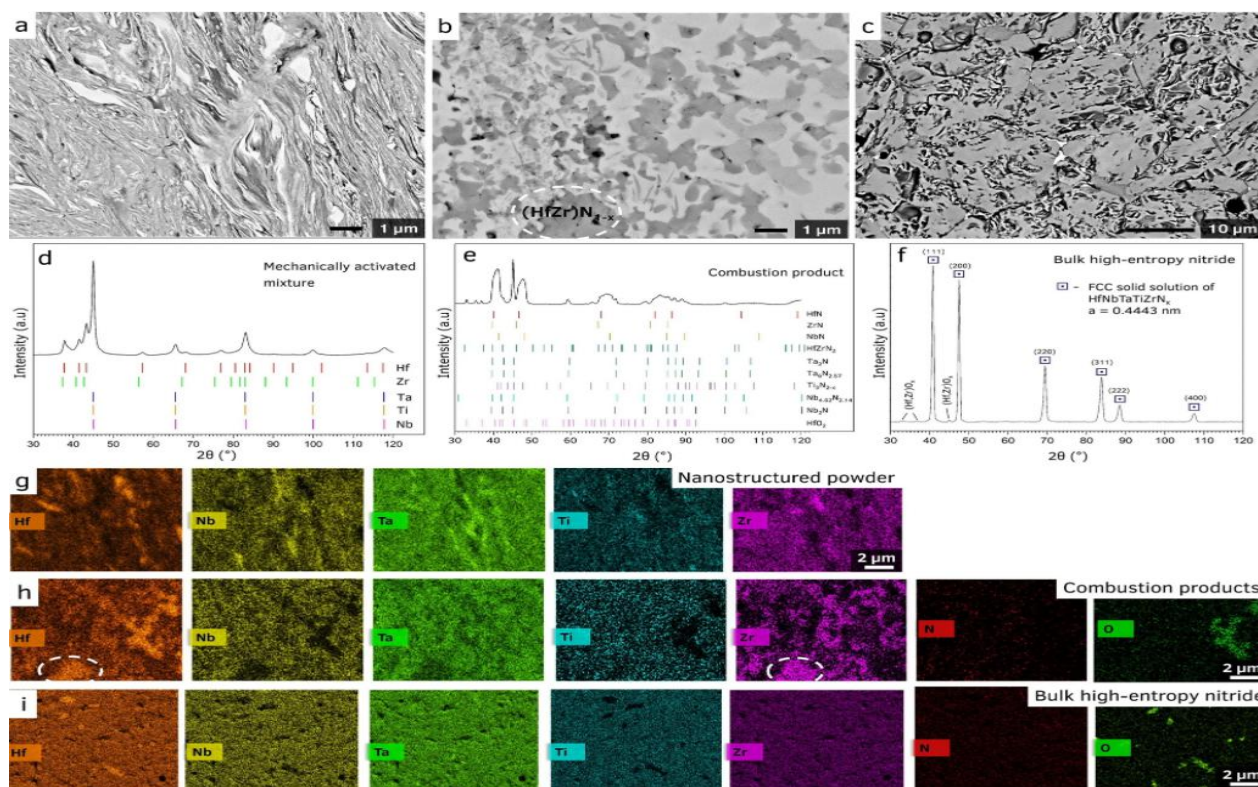


Рисунок 2.10 - (а) Механически активированная смесь Hf + Nb + Ta + Ti + Zr, (б) продукты сгорания, (в) и SEM-сечение высокоэнтропийного нитрида, спеченного в плазме искрового разряда. (д) Соответствующие рентгенограммы механически активированной смеси Hf + Nb + Ta + Ti + Zr, (е) после синтеза горением и (ф) после искрового плазменного спекания. (г) Диаграмма EDS механически активированной смеси показывает, что фазы находятся в тесном

контакте, но все же разделены, (h) продукты сгорания демонстрируют множество различных распределений элементов и (i) демонстрируют полностью компактный и гомогенный HfN.

Подробное исследование ТЕМ (рис 2.11) было выполнено для подтверждения присутствия HfN в спеченном образце и определения состава фазы HfN. Однофазная структура спеченного высокоэнтропийного нитрида была подтверждена с помощью HRTEM (рис 2.11 а) и дифракционной картины выбранной площади (SAED) (рис 2.11 б). Паттерн SAED представляет собой гранецентрированную кубическую структуру высокоэнтропийного нитрида.

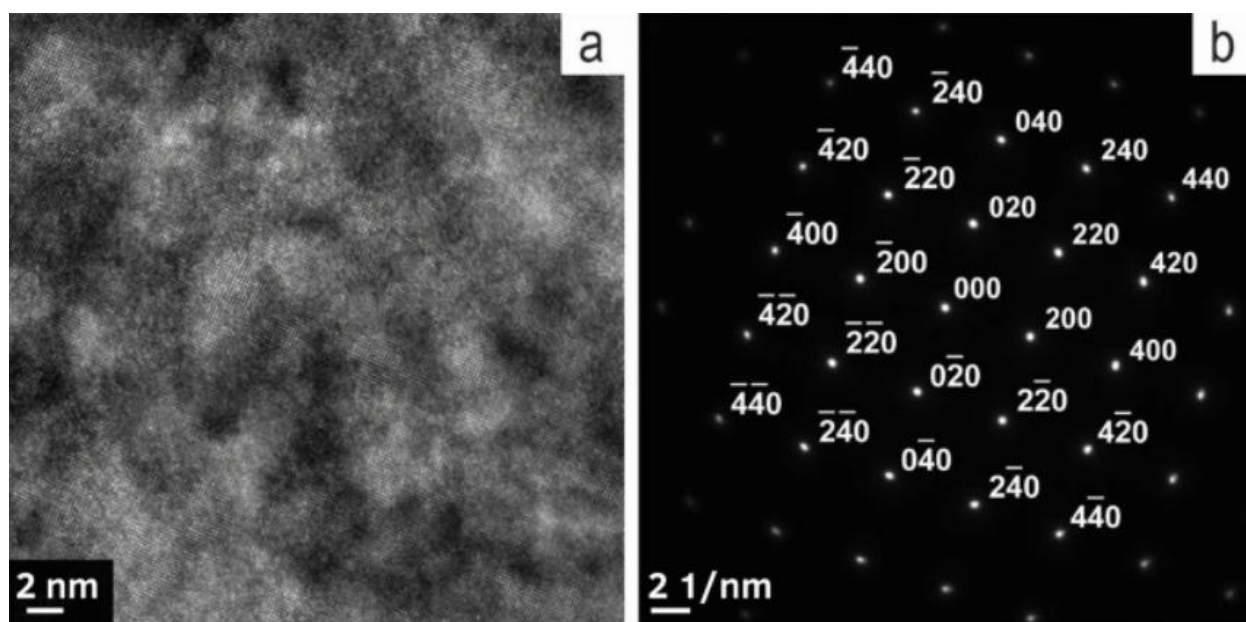


Рисунок 2.11 - (а) HRTEM-изображение искрового плазменного спекания высокоэнтропийного нитрида; (б) выбранная область дифракции электронов  $(\text{HfNbTaTiZr})\text{N}_x$  вдоль оси зоны  $[001]$

Полученный объемный высокоэнтропийный нитрид  $(\text{Hf}_{0,2}\text{Nb}_{0,2}\text{Ta}_{0,2}\text{Ti}_{0,2}\text{Zr}_{0,2})\text{N}$  демонстрирует отличную твердость (до 33 ГПа) и вязкость разрушения (до  $5,2 \text{ МПа}\cdot\text{м}^{1/2}$ ), что превышает норму смеси. Ожидаемые значения, а также все другие указанные бинарные и высокоэнтропийные керамические материалы могут использоваться для сверхтвердых покрытий, конструкционных материалов, оптики и т. д.

*Высокоэнтропийный силицидный керамический материал*

Группа Zhang Guojun [16] и группа Gild [17] почти одновременно сообщили о новой высокоэнтропийной силицидной керамике, конкретный состав и метод приготовления этих двух материалов немного отличаются. Первый состоит из  $(\text{Ti}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Mo}_{0.2}\text{W}_{0.2})\text{Si}_2$ , который получают реакционным спеканием простого порошка металла и кремния, а второй -  $(\text{Ti}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Mo}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{W}_{0.2})\text{Si}_2$ , который состоит из видов силицидов, получаемых путем твердого раствора друг с другом. Оба являются гексагональными структурами, и оба демонстрируют механические свойства, превышающие среднее значение для пяти однокомпонентных силицидов, и чрезвычайно низкую теплопроводность.

Среди них  $(\text{Ti}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Mo}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{W}_{0.2})\text{Si}_2$ , высокоэнтропийный силицид, имеет гексагональную структуру C40 типа  $\text{CrSi}_2$  с последовательностью укладки ABC (рис 2.12); по сравнению со структурой, описанной в предыдущем исследовании, он представляет собой более сложную кристаллическую структуру (с более низкой симметрией  $P6_222$ ).



### Hexagonal High-Entropy Metal Disilicide

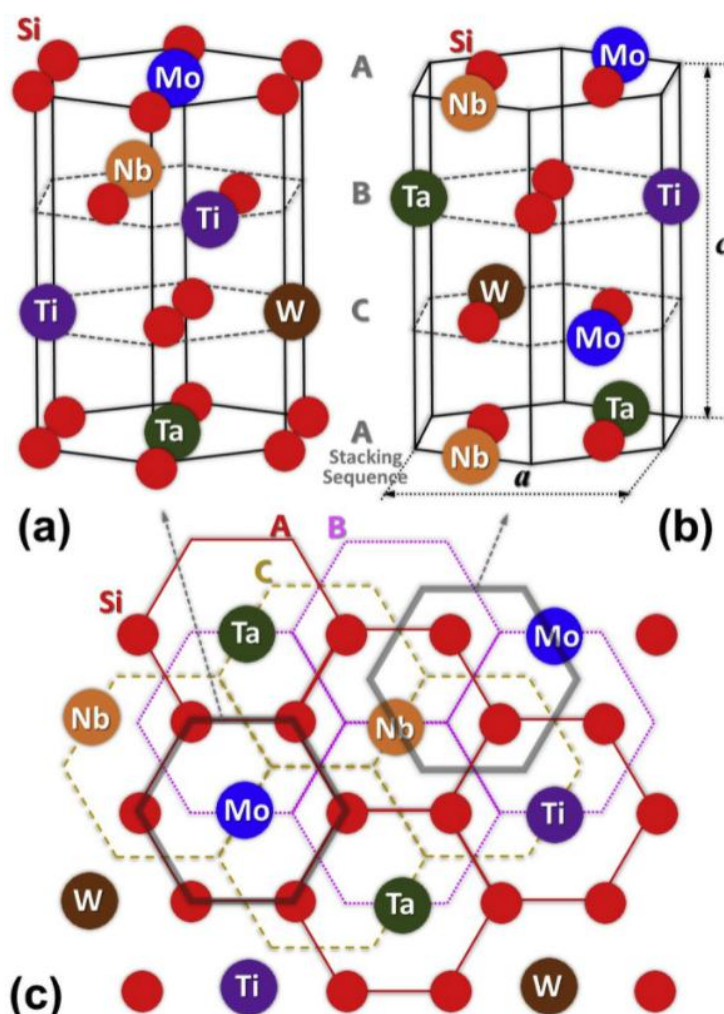


Рисунок 2.12 - Схематическое изображение атомной структуры гексагонального высокоэнтропийного дисилицида с последовательностями укладки ABC (т.е. структура прототипа  $\text{CrSi}_2$ ). Здесь (a) и (b) - два альтернативных вида гексагональных ячеек (но не элементарных ячеек), а (c) - вид в плоскости, где положения атомов Si и металла показаны для слоя A, в то время как только гексагональные сетки Si показаны для слоев B и C для ясности. Обозначены параметры решетки ( $a$  и  $c$ ). Отметим, что  $a$  - это не край гексагональных ячеек, показанных на (a) и (b), а расстояние между двумя катионами металла внутри слоя.

По сравнению с другими дисилицидами металлов теплопроводность этого (гексагонального) высокоэнтропийного  $(\text{Ti}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Mo}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{W}_{0.2})\text{Si}_2$  значительно снижена [33]. Подгоняя модель многослойной термодиффузии к

экспериментальным данным отношения [34], наиболее подходящая теплопроводность определена равной  $6,9 \pm 1,1 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$ .

Compound	Crystal Structure	Vickers Hardness (GPa)	Thermal Conductivity [ $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$ ]
MoSi <sub>2</sub>	Tetragonal	9–14	65
NbSi <sub>2</sub>	Hexagonal	5.4	19.1
TaSi <sub>2</sub>	Hexagonal	13	21.9
TiSi <sub>2</sub>	Orthorhombic	8.5	45.9
WSi <sub>2</sub>	Tetragonal	8.2	46.6
Rule-of-mixture average of five metal disilicides		9.32	40
(Mo <sub>0.2</sub> Nb <sub>0.2</sub> Ta <sub>0.2</sub> Ti <sub>0.2</sub> W <sub>0.2</sub> )Si <sub>2</sub>	Hexagonal	11.6±0.5	6.9±1.1

Рисунок 2.13 - Сравнение характеристик высокоэнтропийного  $(\text{Ti}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Mo}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{W}_{0.2})\text{Si}_2$  и пяти отдельных дисилицидов металлов.

### 3. Применение однофазной высокоэнтропийной керамики

Перспективы применения новой высокоэнтропийной керамики очень широки, успешно применяются не только в конструкционных материалах, но и в функциональных материалах [13].

1) Литий-ионный аккумулятор - Сверхпроводимость, наблюдаемая в  $(\text{MgCoNiCuZn})\text{O}$ , послужила толчком к дальнейшим исследованиям по использованию этого материала в литий-ионных батареях. В качестве материала анода (отрицательного электрода)  $(\text{MgCoNiCuZn})\text{O}$  обеспечивает высокую аккумулирующую способность Li, сохранность и хорошую циклическую стабильность. Такая высокоэнтропийная керамика имеет

определенные перспективы и преимущества при использовании литий-ионных аккумуляторов.

2) В 2018 году команда Джина использовала стратегию мягкой мочевины для механохимического содействия синтезу порошка высокоэнтропийного нитрида металла и открыла уникальные химические и структурные свойства высокоэнтропийного  $(\text{CrMoNbVZr})\text{N}$ . NEMN-1 получил особое внимание как суперконденсатор; в эксперименте поведение суперконденсатора NEMN-1 оценивалось в обычной трехэлектродной батарее с 1 м КОН в качестве электролита, проволочным противоэлектродом из Pt и электродом сравнения Ag/AgCl. На рисунке 3.1 показана кривая циклической вольтамперометрии (CV) NEMN-1 (от -1,0 до 0 vs Ag/AgCl), измеренная при различных скоростях сканирования (10, 20, 50, 100 и 200 мВ/с). Расчетные значения удельной емкости NEMN-1 составляют 230, 175, 113, 78 и 54  $\text{F}\cdot\text{g}^{-1}$  соответственно, что соответствует скоростям сканирования 10, 20, 50, 100 и 200 мВ/с соответственно.

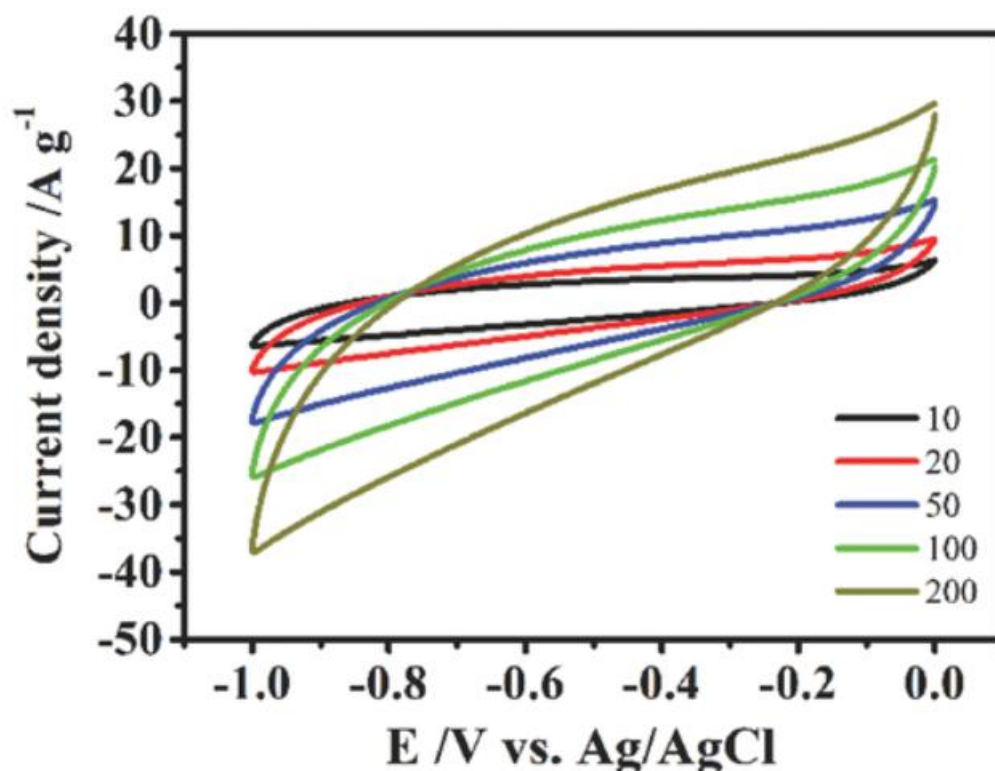




Рисунок 3.1 - Кривые CV получены при различных скоростях сканирования 10, 20, 50, 100 и 200 мВ / с для электрода HEMN-1 в 1 м КОН электролите в трехэлектродной ячейке.

Следует отметить, что емкостные характеристики керамических образцов с высокоэнтропийным нитридом выше, чем у конденсаторов из нитрида металла, описанные в другой литературе. Например, при скорости сканирования 100 мВ/с при использовании 1 м КОН в качестве электролита HEMN-1 показывает более высокую емкость (78 Ф/г), чем электрод с нанопроволокой VN@C (46,9 Ф/г). Кроме того, для оценки фактических характеристик HEMN-1 использовалась двухэлектродная батарея. HEMN-1 показал емкость  $20 \text{ Ф} \cdot \text{г}^{-1}$  при скорости сканирования  $100 \text{ мВ} \text{ с}^{-1}$  на 1 м КОН. Удельная емкость На основе плотности материала электрода вычисленная объемная удельная емкость составляет  $38,4 \text{ Ф} \text{ см}^{-3}$ , а плотность HEMN-1, измеренная пикнометром, составляет  $1,92 \text{ г} \text{ см}^{-3}$ . Таким образом, этот недавно разработанный HEMN является подходит для приложений, связанных с энергетикой.

### 3) Гидротермальное химическое разложение [11]

(MgCoNiCuZn)O стимулировал развитие (MgCoNiFe)O<sub>x</sub> ( $x \approx 1,2$ ) мультикатионных оксидов, которые используют смешанное твердое состояние (каменная соль и шпинель) в сочетании с современной крупномасштабной химической инфраструктурой ( $1100 \text{ }^\circ\text{C}$ ) температура восстановления, осуществляется двухступенчатое термохимическое разделение воды. (MgCoNiFe)O<sub>x</sub> превосходит самые современные материалы по нескольким параметрам: выход H<sub>2</sub> составляет  $10,1 \pm 0,5 \text{ мл}$  при  $1300 \text{ }^\circ\text{C}$  и  $1,4 \pm 0,5 \text{ мл}$  при  $1100 \text{ }^\circ\text{C}$ , в то время как температура феррита церия и шпинели должна быть  $>1300 \text{ }^\circ\text{C}$  для образования значительного количества H<sub>2</sub>.

### 4) Катализатор

Что касается катализаторов, то сплавы металлов с высокой энтропией изучались в течение определенного периода времени и показали полезные

свойства, в том числе: коррозионную стойкость, которая ограничивает использование традиционных сплавов переходных металлов в качестве электрокатализаторов в кислой или щелочной среде; стойкость к отравлению; количество уникальных сайтов связывания обеспечивает почти непрерывное распределение энергии адсорбции и увеличивает смешиваемость элементов для оптимизации силы связывания для повышения активности. Фактически, было показано, что высокоэнтропийные сплавы эффективны в различных реакциях, таких как окисление, разложение, восстановление и разложение.

Комбинация химии связей в высокоэнтропийной керамике может стать многообещающим способом катализа. Связаны последние три набора отчетов. Во-первых, команда Нао Chen разработала простой, недорогой и легко масштабируемый метод синтеза энтропийно-стабильных твердых растворов оксидов металлов. Синтезированный твердый раствор энтропийно-стабилизированного оксида металла  $(\text{NiMgCuZnCo})\text{O}_x$  может быть использован в качестве катализатора окисления CO и отличного носителя для стабилизации высокодисперсных или даже моноатомно диспергированных частиц платины даже при температурах до 900 °C. Использование Pt, Ni, Mg, Cu, Zn и Co не только делает активные центры высокодисперсными для улучшения каталитической активности окисления CO, но также приводит к экстремальной термической стабильности в жестких условиях из-за поведения стабилизации энтропии внутри металла. Оксид Раствор для выживания. Катализатор показал хорошую возможность повторного использования в течение по меньшей мере 40 часов без какого-либо снижения каталитической активности. Chen Нао сообщил о методе механохимического синтеза известного высокоэнтропийного оксида металла  $(\text{NiMgCuZnCo})\text{O}$  при помощи метода высокотемпературного синтеза ( $>900$  °C). Преимущества этого метода дополнительно подтверждаются введением до 5 мас. % Драгоценных металлов в виде отдельных атомов или нанокластеров в  $(\text{NiMgCuZnCo})\text{O}$ , который демонстрирует хорошую стабильность при высоких температурах и образуется при гидрировании

атмосферного  $\text{CO}_2$  Высокая каталитическая активность в  $\text{CO}$ . Во второй серии отчетов мезопористый  $(\text{MgCoNiCuFe})\text{O}_x - \text{Al}_2\text{O}_3$  исследовался на окисление  $\text{CO}$ . Полная конверсия  $\text{CO}$  происходила при  $260^\circ\text{C}$ . Керамика демонстрировала незначительную деградацию через 48 ч 130 и более высокую устойчивость к сере по сравнению с  $\text{CuO}-\text{Al}_2\text{O}_3$ . В третьей группе отчетов системы, содержащие азот, углерод, кислород и бор, были определены как перспективные кандидаты для восстановления кислорода.

Несмотря на хорошую активность таких систем, для того, чтобы конкурировать с платиной и самыми передовыми сплавами, по-прежнему необходимы улучшенные характеристики. Керамика с высокой энтропией может демонстрировать наилучшее пересечение критических свойств, особенно в нетривиальных геометриях и / или если их структура пор настроена на увеличение площади их поверхности. Принимая во внимание их многообещающие свойства, можно ожидать, что в ближайшие несколько лет будет проведено множество исследований в области катализа на основе высокоэнтропийной керамики.

#### 5) Тепловая защита и охрана окружающей среды

$(\text{MgCoNiCuZn})\text{O}$  демонстрирует аморфную теплопроводность - низкие значения, увеличивающиеся с температурой - без ущерба для его механической жесткости, что является обычным компромиссом для неметаллов, в которых фононы являются доминирующими теплоносителями. Рэлеевское рассеяние (а не процессы переброса с разрушением импульса) оказалось доминирующим механизмом рассеяния фононов, определяющим теплопроводность в высокоэнтропийной керамике. Теплопроводность может быть дополнительно снижена добавлением шестого катиона ( $\text{Sc}$ ,  $\text{Sb}$ ,  $\text{Sn}$ ,  $\text{Cr}$  или  $\text{Ge}$ ), что возможно в тонких пленках, выращенных с помощью импульсного лазерного осаждения. Результирующее падение теплопроводности в два раза в значительной степени не зависит от массы, но вместо этого вызвано локальным беспорядком ионного заряда, который деформирует кислородную подрешетку и вызывает большие изменения межатомных силовых констант. Оксиды с высокой энтропией

демонстрируют одно из самых высоких соотношений модуля упругости к теплопроводности при комнатной температуре, превосходя таковые у известных термобарьерных покрытий, таких как цирконатные материалы.

#### б) Термоэлектрический элемент [35]

Команда Кан Чена снизила теплопроводность решетки, чтобы сделать высокоэнтропийные полупроводники перспективным материалом для термоэлектрических применений. Характеристики высокоэнтропийных материалов на основе Cu-S были изучены с помощью шаровой мельницы и SPS для синтеза  $\text{Cu}_5\text{SnMgGeZnS}_9$  и  $\text{Cu}_3\text{SnMgInZnS}_7$ . Композиция  $\text{Cu}_5\text{Sn}_{1.2}\text{MgGeZnS}_9$  имеет коэффициент термоэлектрической добротности (ZT) 0,58, измеренный при 723 К, что аналогично значению упорядоченных тройных и четвертичных алмазоподобных сульфидов. За счет внесения беспорядка улучшения почти не происходит, вероятно, потому что теплопроводность материала Cu-S уже очень мала. Более многообещающим подходом может быть введение беспорядка в материалы, которые потенциально могут стать хорошими термоэлектрическими материалами, если их теплопроводность может быть уменьшена.

Высокоэнтропийный селенид  $(\text{AgBiGe})\text{Se}$  синтезируется реакцией плавления GeSe и  $\text{AgBiSe}_2$  в герметичной вакуумной трубке с образованием однородной структуры каменной соли, состоящей из 50 %  $\text{AgBiSe}_2$ . Его коэффициент мощности составляет  $3,8 \text{ мкВт см}^{-1} \cdot \text{К}^{-2}$  при 677 К, теплопроводность составляет  $0,43 \text{ Вт м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$  при 300 К, а ZT достигает максимального значения 0,45 при 677 К.

#### *Применение высокоэнтропийной неупорядоченной тонкопленочной керамики*

Высокоэнтропийные нитриды, карбиды, бориды и оксидные пленки наносятся на кремний, сталь, сплав  $\text{Ti}_6\text{Al}_4\text{V}$ , кварцевое стекло, карбид WC-Co с целью получения высокоэнтропийно-разупорядоченной тонкопленочной керамики. Исследования показали, что высокоэнтропийные керамические пленки имеют потенциальные области применения, такие как износостойкие, коррозионно-стойкие и стойкие к окислению покрытия, диффузионные

барьеры микроэлектроники, электронная керамика, биосовместимые покрытия, спинтронные антиферромагнитные слои и теплоизоляторы [16].

1) Износостойкое, антикоррозийное и антиокислительное покрытие.

Карбиды, нитриды, карбонитриды и оксиды с высокой энтропией обладают хорошей стойкостью к окислению и коррозии благодаря упрочнению твердого раствора и медленной диффузии [14]. Они имеют важное прикладное значение в качестве защитных покрытий от износа, окисления и коррозии механических деталей, таких как режущие инструменты и сверла, которые работают при высоких температурах в агрессивных средах. Проверьте твердость, модуль упругости, скорость износа, коэффициент трения, удельное сопротивление, набор массы во время отжига на воздухе, а также ток и потенциал коррозии в растворе коррозии карбидных, нитридных и оксидных покрытий [17]. Установлено, что значения твердости пленок  $\text{Al}_2(\text{CoCrCuFeNi})\text{O}$  и  $(\text{AlCrTaTiZr})\text{O}$  являются самыми высокими среди доступных оксидных пленок, бинарные оксидные пленки редко превышают 20 ГПа.

2) Барьеры распространения для приложений микроэлектроники [18]

Продолжающаяся миниатюризация микроэлектронных схем достигла сегодняшних наноразмеров, что требует новых материалов для предотвращения взаимной диффузии компонентов меди и кремния с образованием  $\text{Cu}_3\text{Si}$ , что увеличивает сопротивление, снижает эффективность и мешает работе устройства. Нитриды с высокой энтропией особенно перспективны в этом типе применения, потому что искажение решетки и увеличение плотности упаковки, вызванные разным радиусом элементов, могут привести к медленной диффузии даже в слоях толщиной всего несколько нанометров [17]. Очень тонкие (10 нм или меньше) пленки нитридов на кремниевых подложках обычно имеют аморфную структуру и внедрены в нанокристаллы с ГЦК-решеткой, где отсутствие границ зерен способствует медленной диффузии. Слой высокоэнтропийного нитрида обычно остается нетронутым при температуре ниже  $800\text{ }^\circ\text{C}$ , и измерения с помощью просвечивающей электронной

микроскопии показывают четкую границу между слоями кремния, нитрида и меди.

### 3) Электронная керамика [19]

В зависимости от системы сплава оксиды могут оказывать противоположное влияние на удельное сопротивление. Электронные керамические материалы, разрабатываемые в настоящее время, в основном включают  $(AlCrTaTiZr)O$  и  $(TiFeCoNi)O$ .

### 4) Антиферромагнитный слой спинтроники [20]

$(MgCoNiCuZn)O$  обладает антиферромагнитным поведением. Уравновешивая химический беспорядок (максимум при одинаковой концентрации атомов) и соотношение магнитных ионов, можно оптимизировать обменное взаимодействие на границе раздела ферромагнетик или антиферромагнетик. Регулируя концентрацию Co, можно повысить обменное смещение до значения, которое на порядок выше, чем у гетероструктуры пермаллой или CoO.

### 5) Теплоизоляция

Теплопроводность пленки гексакатион  $Ba(ZrSnTiHfNb)O_3$ , синтезированной импульсным лазерным осаждением, находится в диапазоне  $0,54 \sim 0,58 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$ , что почти лучше, чем у других монокристаллов с одним или двумя различными элементами на уровне Участок В Теплопроводность оксида перовскита на порядок ниже. Это отличный изоляционный материал [21].

### 6) Может сделать покрытие биосовместимым

Благодаря износостойкости и коррозионной стойкости высокоэнтропийных карбидов и нитридов, если будет доказано, что они биосовместимы и нетоксичны, они будут многообещающими материалами для покрытий для биомедицинских имплантатов. Покрытия из карбидов и нитридов имеют лучшую коррозионную стойкость, чем голые подложки в моделируемых биологических жидкостях [22]. Кремнийсодержащее покрытие может

улучшить адгезию и жизнеспособность клеток, среди которых (HfNbSiTiZr)C является наиболее биосовместимым протестированным материалом.

#### *Будущее направление*

1) В обратной системе независимая растворимость катионной и анионной подрешеток делает их неупорядоченными по конфигурации [23]. Помимо увеличения энтропии, это также может еще больше расширить композиционное пространство.

2) В различных условиях реакции, регулируя компоненты, сила связывания катализатора не может быть ни сильной, ни слабой, чтобы получить более высокую активность. Множество связывающих сред обеспечивают распределение энергии адсорбции, которое может хорошо удерживать реагенты и промежуточные соединения, включая те, которые трудно использовать в обычных средах [24].

3) Гигантская диэлектрическая проницаемость, по-видимому, характерна для сплава (MgCoNiCuZn)O; ее механизм пока не ясен и требует дальнейшего изучения.

4) Показатель термоэлектрической эффективности зависит от отношения электропроводности к теплопроводности коэффициента Зеебека [25]. Неупорядоченность снижает теплопроводность решетки, поэтому состав может быть выбран так, чтобы оптимизировать соотношение между коэффициентом Зеебека и теплопроводностью электронов, тем самым улучшая термоэлектрическую эффективность [26].

5) Механические свойства сильно взаимозависимы: твердые и прочные материалы хрупкие, а их износостойкость зависит от отношения твердости к модулю упругости и коэффициента трения [27]. Для оптимизации соотношения прочности и пластичности металлических сплавов использовались методы проектирования беспорядка и микроструктуры; мы предполагаем, что аналогичные методы будут применены к конструкционной керамике [28]

#### 4. Материалы и методики

Объектом исследования выступала керамический твердый раствор (Zr, Hf, Nb)C, полученные из порошков ZrC, HfC и NbC в эквимольном соотношении.

Приготовление порошковых смесей с их одновременной активацией производилось в планетарной мельнице-активаторе типа АГО в среде аргона в течение 3 минут.

Образцы высокоэнтропийного твёрдого раствора получены горячим прессованием при температуре 2000 °С и давлении 35 МПа в течение 30 мин в атмосфере аргона.

Плотность керамических образцов была определена методом гидростатического взвешивания.

Исследования фазового состава и параметров кристаллической структуры производились методом дифракции рентгеновских лучей на дифрактометре типа ДРОН с фильтрованным  $\text{CuK}\alpha$  излучением. Съёмка производилась по точкам с шагом  $0.05^\circ$  и экспозицией 5 с. в угловом диапазоне  $2\theta = 20 - 100$  градусов. Индексирование рентгенограмм осуществлялось с помощью программного обеспечения Renex. Идентификация фазового состава осуществлялась с помощью базы данных ASTM.

Микроскопические исследования осуществлялись с помощью сканирующего электронного микроскопа “Vega Tescan”.

Твердость керамики была определена индентированием пирамиды Виккерса с нагрузкой 200 г в течение 10 с на твердомере ПМТ-3.



## 5. Исследование структуры и свойств керамики, стабилизированной энтропией

На рисунке 5.1 приведена рентгенограмма порошка карбида гафния (производство Россия). Фазовый состав HfC был представлен кубической модификацией с параметрами решетки  $a = 0,496$  нм. Кроме этого, на рентгенограмме регистрировались слабые рефлексы оксидной фазы.

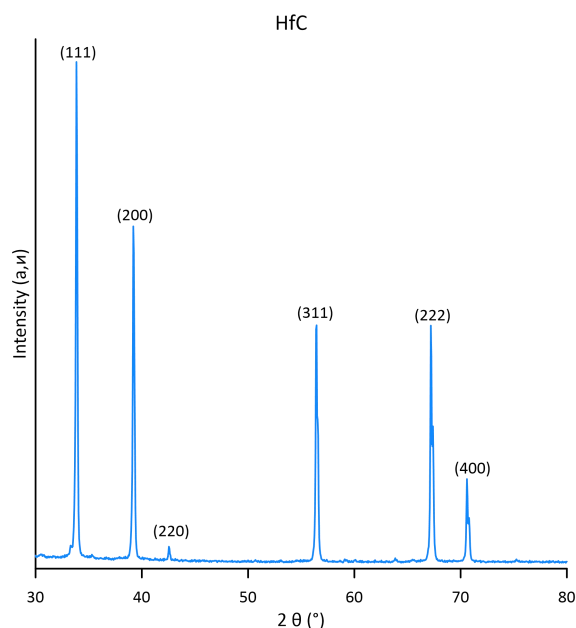


Рисунок 5.1 – Рентгенограмма карбида гафния

Фазовый состав керамического порошка карбида циркония был представлен кубической модификацией, рисунок 5.2. Параметр элементарной ячейки составил  $a = 0,474$  нм.

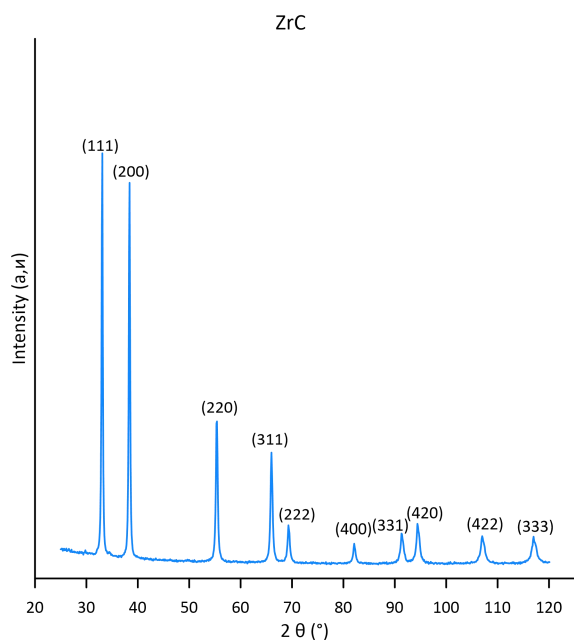


Рисунок 5.2 – Рентгенограмма карбида циркония

Фазовый состав порошка карбида ниобия был представлен кубической модификацией, рисунок 5.3. Параметр элементарной ячейки составил  $a = 0,4454$  нм.

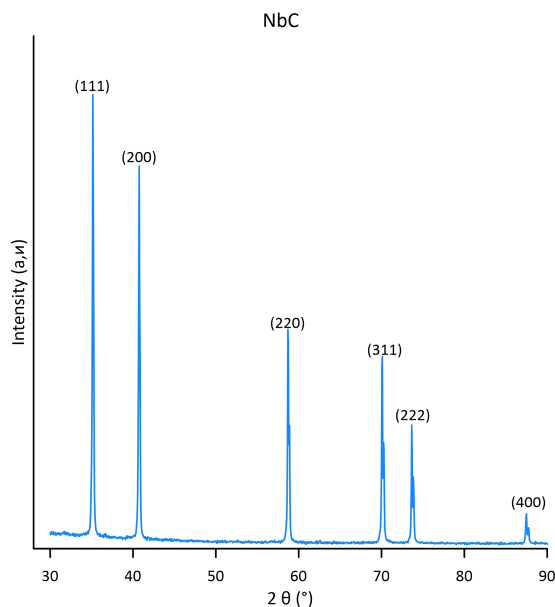


Рисунок 5.3 – Рентгенограмма карбида ниобия

На рисунке 5.4 приведена рентгенограмма керамического твердого раствора  $(Zr, Hf, Nb)C$ , полученного горячим прессованием. Видно, что на дифрактограмме регистрируется основной набор рефлексов, принадлежащих

кубической гранцентрированной решетке (Zr, Hf, Nb)C (пространственная группа  $O_h^5 - Fm\bar{3}m$ ). Параметр решетки полученной керамики был равен  $a = 0,4599$  нм.

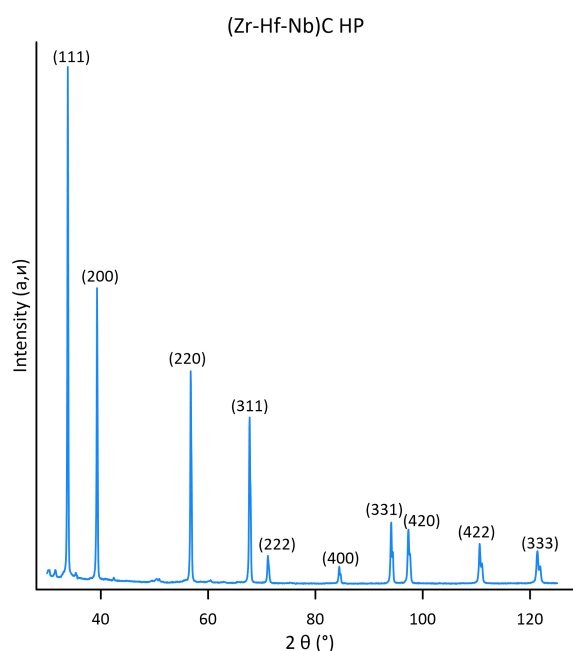


Рисунок 5.4 - Рентгенограмма керамики (Zr, Hf, Nb)C.

На рисунке 5.5 приведены изображения микроструктуры керамики (Zr, Hf, Nb)C. Видно, что поверхность керамики однородна, границ раздела фаз не наблюдается. Также на поверхности полированной поверхности присутствует остаточная пористость, которая не превышала 10 %. Средний размер пор был равен  $2,5 \pm 0,04$  мкм. Распределение пор по размерам носило унимодальный характер.

Относительная плотность образцов керамики (Zr,Hf,Nb)C составила 0,87.

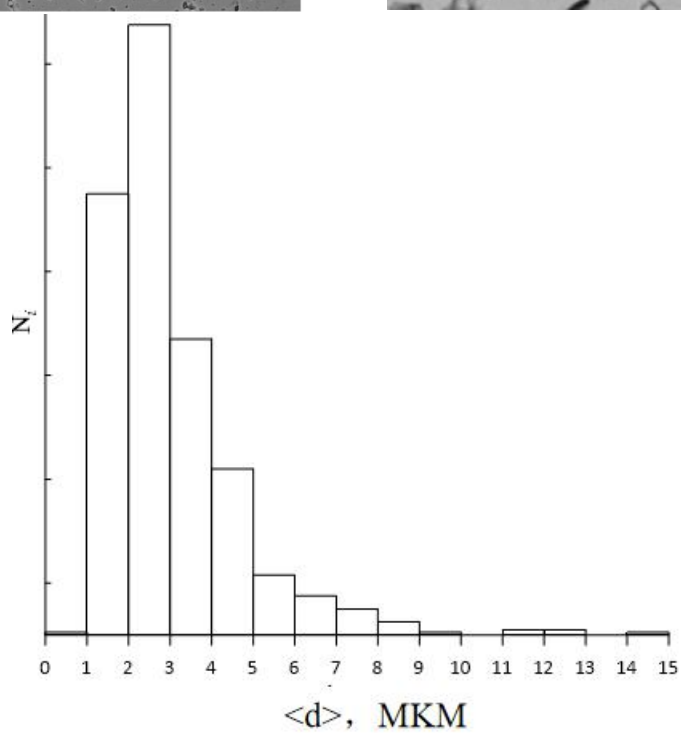
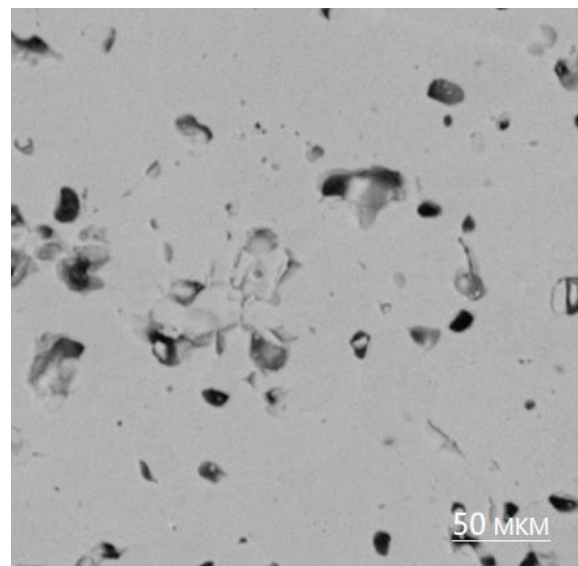
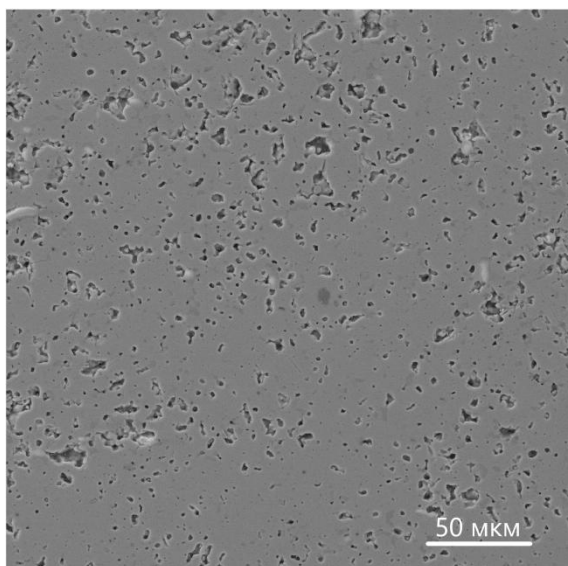


Рисунок 5.5 – Микроструктура образцов высокоэнтروпийной керамики и распределение пор по размерам (Zr, Hf, Nb)C.

Результаты элементного анализа показали, что распределение химических элементов в матрице материала однородно, рисунок 5.6.

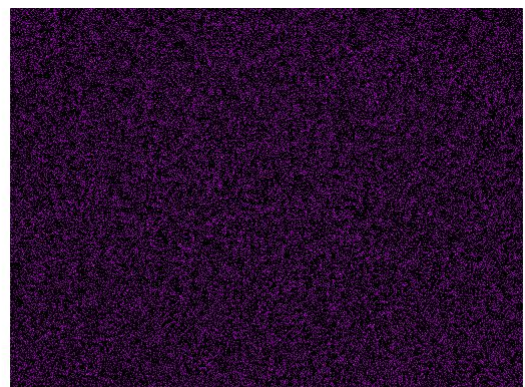
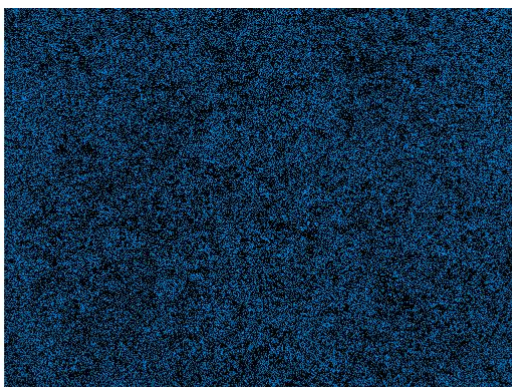
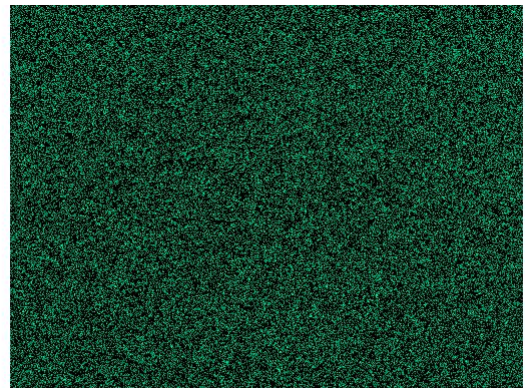
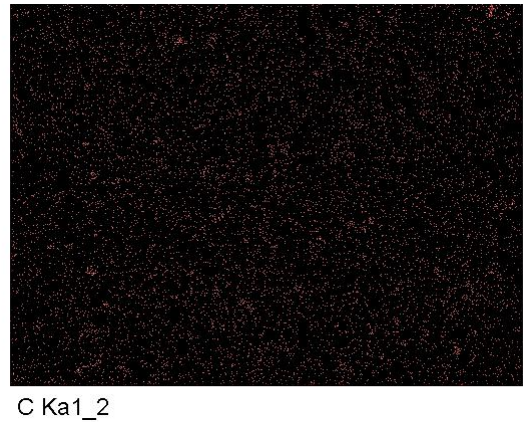
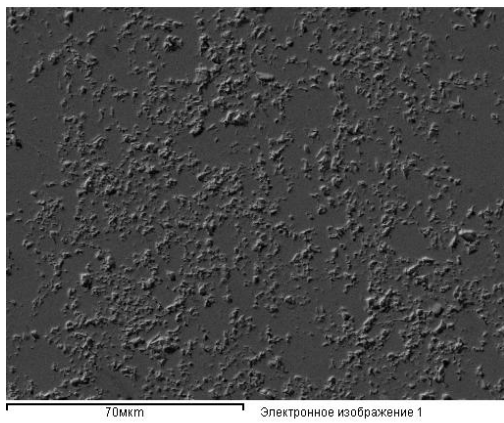


Рисунок 5.6 – Изображение микроструктуры и результаты элементного анализа

Твердость керамики составила  $25,7 \pm 0,6$  ГПа, таблица 5.1 Кроме этого твердость керамики была рассчитана по правилу смеси, согласно которому значение величины, соответствующее целому объекту, равно сумме значений величины его частей [36]. В качестве значений твердости карбидов металлов приняты величины, приведенные в таблице, и взятые из работы [37]:

$$H(\text{Zr, Hf, Nb})\text{C} = 0.33 \cdot H(\text{ZrC}) + 0.33 \cdot H(\text{ZrC}) + 0.33 \cdot H(\text{ZrC}) = 24.09 \text{ ГПа.}$$

Видно, что полученное значение твердости керамики, стабилизированной энтропией, было выше величины твердости, рассчитанной по правилу смеси.

Таблица 5.1 - Значения твердость керамики (Zr, Hf, Nb)C, бинарных карбидов и величины, рассчитанной по правилу смеси.

<b>Состав</b>	<b>Твердость, ГПа</b>
(Zr, Hf, Nb)C	25,7±0,6
ZrC	27
HfC	26
NbC	20
Рассчитанная по правилу смеси	24,09



**ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА  
«ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И  
РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»**

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
154Б71	Юй Яо

<b>Школа</b>	<b>ИШНПТ</b>	<b>Отделение школы (НОЦ)</b>	<b>ОМ</b>
<b>Уровень образования</b>	бакалавриат	<b>Направление/специальность</b>	Материаловедение и технология материалов

**Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:**

1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	Стоимость материальных ресурсов и специального оборудования определены в соответствии с рыночными ценами г. Томска Тарифные ставки исполнителей определены штатным расписанием НИ ТПУ
2. Нормы и нормативы расходования ресурсов	Норма амортизационных отчислений на специальное оборудование
3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	Отчисления во внебюджетные фонды 30 %

**Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:**

1. Оценка коммерческого потенциала, перспективности и альтернатив проведения НИ с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	1. Анализ конкурентных технических решений. 2. SWTO – анализ.
2. Планирование и формирование бюджета научных исследований	1. Планирование работ. 2. Разработка графика Ганта. 3. Формирование бюджета затрат.
3. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	Описание потенциального эффекта.

**Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):**

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Матрица SWOT
3. Альтернативы проведения НИ
4. График проведения и бюджет НИ
5. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ

<b>Дата выдачи задания для раздела по линейному графику</b>	01.02.2021г.
---	--------------

**Задание выдал консультант:**

<b>Должность</b>	<b>ФИО</b>	<b>Ученая степень, звание</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
доцент ОСГН, ШБИН	Былкова Татьяна Васильевна	канд. экон. наук		01.02.2021г.

**Задание принял к исполнению студент:**

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>	<b>Подпись</b>	<b>Дата</b>
154Б71	Юй Яо		01.02.2021г.

## 6. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

### 6.1. Общая информация

Основная цель раздела - оценить перспективы развития и спланировать финансовую и коммерческую ценность конечного продукта, который будет продемонстрирован в рамках плана исследования.

Данный раздел, предусматривает решение следующих задач:

- оценить коммерческий потенциал разработки;
- составить план научно-исследовательских работ;
- рассчитать бюджет научно-исследовательской работы;
- определить ресурсную, финансовую, бюджетную эффективность исследования.

### 6.2. Потенциальные потребители результатов исследования

Используя метод сегментирования, разделим потребителей разработки. Критерий для сегментирования потребителей: место расположения компании-потребителя. Нами были выбраны компаний, которые находятся в КНР, среди них, компании «Lu Guan Star», «Foshan Kaimeidi», «Tianjin Liangya».

### 6.3. Анализ конкурентных технических решений

Поскольку рынок продолжает меняться, необходимо систематически детально анализировать развитие рыночной конкуренции. В таблице 6.1 показано результат сравнения разработок-конкурентов и разработки данного НИ с точки зрения технических и экономических критериев оценки эффективности.

Таблица 6.1 – Сравнение конкурентных технических решений (технология получения высокоэнтропийных керамических пленок)

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкуренто-способность		
		Б <sub>ф</sub>	Б <sub>к1</sub>	Б <sub>к2</sub>	К <sub>ф</sub>	К <sub>к1</sub>	К <sub>к2</sub>
1	2	3	4	5	6	7	8
<b>Технические критерии оценки ресурсоэффективности</b>							



1. Повышение производительности труда пользователя	0.05	5	4	4	0.25	0.2	0.2
2. Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0.05	5	5	3	0.25	0.25	0.15
3. Помехоустойчивость	0.12	4	3	5	0.48	0.36	0.6
4. Энергоэкономичность	0.12	5	4	3	0.6	0.48	0.36
5. Надежность	0.02	3	3	4	0.06	0.06	0.08
6. Уровень шума	0.12	5	3	4	0.6	0.36	0.48
7. Безопасность	0.05	5	5	3	0.25	0.25	0.15
8. Потребность в ресурсах памяти	0	1	1	1	0	0	0
9. Функциональная мощность	0.05	4	3	3	0.2	0.2	0.15
10. Простота эксплуатации	0.05	4	4	3	0.2	0.2	0.15
<b>Экономические критерии оценки эффективности</b>							
1. Конкурентоспособность продукта	0,05	4	3	4	0.2	0.15	0.2
2. Уровень проникновения на рынок	0,02	5	4	3	0.1	0.08	0.06
3. Цена	0,05	4	3	3	0.2	0.15	0.15
4. Предполагаемый срок эксплуатации	0,1	5	5	4	0.5	0.5	0.4
5. Послепродажное обслуживание	0,04	5	4	5	0.2	0.16	0.2
6. Финансирование научной разработки	0.05	4	3	5	0.2	0.15	0.25
7. Срок выхода на рынок	0.04	4	4	4	0.16	0.16	0.16
8. Наличие сертификации разработки	0.02	4	4	4	0.08	0.08	0.08
Итого	1	78	67	67	4.53	3.88	3.82

Проведенный анализ конкурентных технических решений показал, что исследование является наиболее актуальным и перспективным, имеет конкурентоспособность.

#### **6.4. SWOT-анализ**

С целью изучения внешней и внутренней среды проекта в данной работе был проведен SWOT-анализ, а также детально оценены преимущества и недостатки, возможности и угрозы исследовательского проекта.

Представим в таблице 6.2 сильные и слабые стороны проекта, а также возможности и угрозы для реализации проекта, которые могут появиться во внешней среде.

Таблица 6.2 – Матрица SWOT-анализа

Сильные стороны	Слабые стороны
С1. Преимущество передовых технологий	Сл1. Отсутствие потенциальных потребителей.
С2. Высокая производительность и дешевое сырье	Сл2. Время подготовки проб для научных исследований велико.
С3. Изделие обладает высокой износостойкостью и устойчивостью к коррозии.	Сл3. Требования к экспериментальному оборудованию очень высоки.
С4. Экологичность технологии	Сл4. Эксперимент имеет большие ошибки и неточности.
С5. Квалифицированные сотрудники.	Сл5. Отсутствие инжиниринговых компаний, которые могут совместно производить.
Возможности	Угрозы
В1. Сотрудничать с зарубежными профессорами в данной области.	У1. Снижение стоимости разработок конкурентов.
В2. Появление потенциального спроса на новые разработки.	У2. Появление зарубежных аналогов и более ранний их выход на рынок.
В3. Сниженные тарифы на сырье.	У3. Появление новых технологий.
В4. Внедрение на мировой рынок, экспорт за рубеж.	

Соотношения параметров представлены в таблицах 6.3–6.6.

Таблица 6.3 – Интерактивная матрица проекта «Возможности проекта и сильные стороны»

Сильные стороны проекта						
Возможности проекта		С1	С2	С3	С4	С5
	В1	-	-	-	-	-
	В2	-	+	+	-	-
	В3	-	-	-	-	-
	В4	-	+	+	-	-

Таблица 6.4 – Интерактивная матрица проекта «Возможности проекта и слабые стороны»

Слабые стороны проекта						
Возможности проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	Сл5
	В1	-	-	-	-	-

	B2	-	-	-	-	-
	B3	-	-	-	-	-
	B4	-	-	+	+	-

Таблица 6.5 – Интерактивная матрица проекта «Угрозы проекта и сильные стороны»

Сильные стороны проекта						
Угрозы проекта		C1	C2	C3	C4	C5
	У1	+	-	+	-	-
	У2	-	-	+	-	-
	У3	-	-	-	-	-

Таблица 6.6 – Интерактивная матрица проекта «Угрозы проекта и слабые стороны»

Слабые стороны проекта						
Угрозы проекта		Сл1	Сл2	Сл3	Сл4	Сл5
	У1	-	-	-	-	-
	У2	-	-	-	-	-
	У3	-	+	+	+	-

Результаты анализа представлены в итоговую таблицу 6.7.

Таблица 6.7 – Итоговая таблица SWOT-анализа

	<p><b>Сильные стороны научно-исследовательского проекта</b></p> <p>C1. Преимущество передовых технологий</p> <p>C2. Высокая производительность и дешевое сырье</p> <p>C3. Изделие обладает высокой износостойкостью и устойчивостью к коррозии.</p> <p>C4. Экологичность технологии</p> <p>C5. Квалифицированные сотрудники.</p>	<p><b>Слабые стороны научно-исследовательского проекта</b></p> <p>Сл1. Отсутствие потенциальных потребителей.</p> <p>Сл2. Время подготовки проб для научных исследований велико.</p> <p>Сл3. Требования к экспериментальному оборудованию очень высоки.</p> <p>Сл4. Эксперимент имеет большие ошибки и неточности.</p> <p>Сл5. Отсутствие инжиниринговых компаний, которые могут совместно производить.</p>
<p><b>Возможности</b></p> <p>B1. Сотрудничать с зарубежными профессорами в</p>	<p><b>Направления развития</b></p> <p>B2C2C3. Высокая стойкость к истиранию и коррозии продуктов постоянно расширяет спрос, а</p>	<p><b>Сдерживающие факторы</b></p> <p>B4Cл3Cл4. Из-за высоких требований к экспериментальному оборудованию и отсутствия</p>

данной области. В2. Появление потенциального спроса на новые разработки. В3. Сниженные тарифы на сырье. В4. Внедрение на мировой рынок, экспорт за рубеж.	высокая производительность и дешевое сырье удовлетворяют потенциальные потребности новых разработок. В4С2С3. Низкая цена на сырье и высокая износостойкость и коррозионная стойкость продукции являются основой для экспорта за границу и выхода на мировой рынок.	инжиниринговых компаний, которые могут производиться совместно, экспорт за границу для выхода на зарубежные рынки затруднен.
<b>Угрозы</b> У1. Снижение стоимости разработок конкурентов. У2. Появление зарубежных аналогов и более ранний их выход на рынок. У3. Появление новых технологий.	<b>Угрозы развития</b> У1С1С3. Наша продукция обладает техническими преимуществами и имеет лучшие свойства материалов, чем продукция других компаний, поэтому мы не беспокоимся о том, что конкуренты сократят затраты на разработку. У2С3. наша продукция отличается высокой износостойкостью и коррозионной стойкостью, что делает ее более привлекательной на мировом рынке.	<b>Уязвимости:</b> У3Сл2Сл3Сл4. Из-за дорогостоящего оборудования и длительного времени на подготовку образцов для испытаний наши продукты все еще имеют большие ошибки и неточности. Так что появление новых технологий - большая угроза.

В результате SWOT-анализа показано, что на преимущества разрабатываемой технологии преобладают над ее недостатками. Данные недостатки, которые на данный момент на практике не устранены, но в теории уже есть возможности для их устранения. Результаты анализа учтены в дальнейшей научно-исследовательской разработке.

### 6.5. Структура работ в рамках научного исследования

Порядок этапов работ и распределение исполнителей для данной научно-исследовательской работы, приведен в таблице 6.8.

Таблица 6.8 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	№ раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение темя диссертации, утверждение плана-графика	Научный руководитель

	2	Календарное планирование выполнения работ	Инженер, научный руководитель
Теоретические исследования	3	Найдите литературу по высокоэнтропийным керамическим пленкам	Инженер
	4	Узнайте, как проверить свойства и качество высокоэнтропийных керамических пленок.	Инженер
Экспериментальные исследования	5	Подготовьте тонкопленочные материалы и используйте нереактивное магнетронное распыление для получения покрытий $ZrB_2$ , $(Zr, Ti) B_2$ и $(Zr, V, Ti, Ta, Hf) B_2$ .	Инженер, научный руководитель
	6	Используйте дифракцию рентгеновских лучей Брэгга-Брентано (XRD) с излучением $CuK\alpha$ , чтобы получить пик XRD.	Инженер
	7	Сканирующий электронный микроскоп (СЭМ) использовался для определения микроструктуры слоев в осажденном и отожженном состояниях.	Инженер
Обобщение и оценка результатов	8	Обработка полученных данных	Инженер
	9	Оценка правильности полученных результатов	Инженер, Научный руководитель
Оформление отчета по НИР	10	Составление пояснительной записки	Инженер

### 6.6. Определение трудоемкости выполнения работ и разработка графика проведения

При проведении научных исследований основную часть стоимости разработки составляют трудовые затраты, поэтому определение трудоемкости проводимых работ является важным этапом составления бюджета.

Для оценки трудоемкости проводимых работ представим расчет показателей: трудоемкость, продолжительность одной работы, календарный коэффициент

Для определения ожидаемого (среднего) значения трудоемкости использована следующая формула:

$$t_{\text{ожи}} = \frac{3t_{\text{min } i} + 2t_{\text{max } i}}{5} \quad (6.6.1)$$

где  $t_{ожі}$  – ожидаемая трудоемкость выполнения  $i$ -ой работы, человекодни;

$t_{mini}$  – минимально возможная трудоемкость выполнения заданной  $i$ -ой работы, человеко-дни;

$t_{maxi}$  – максимально возможная трудоемкость выполнения заданной  $i$ -ой работы, человеко-дни.

Зная величину ожидаемой трудоемкости, можно определить продолжительность каждой  $i$ -ой работы в рабочих днях  $T_{pi}$ , при этом учитывается параллельность выполнения работ разными исполнителями. Данный расчёт позволяет определить величину заработной платы.

$$T_{pi} = \frac{t_{ожі}}{Ч_i} \quad (6.6.2)$$

где  $T_{pi}$  – продолжительность одной работы, рабочие дни;

$t_{ожі}$  – ожидаемая трудоемкость выполнения одной работы, человеко-дни;

$Ч_i$  – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

Для перевода длительности каждого этапа из рабочих в календарные дни, необходимо воспользоваться формулой:

$$T_{ки.инж} = T_{pi} \cdot k_{кал} \quad (6.6.3)$$

где  $T_{ки}$  – продолжительность выполнения  $i$ -й работы в календарных днях;

$T_{pi}$  – продолжительность выполнения  $i$ -й работы в рабочих днях;

$k_{кал}$  – календарный коэффициент.

Календарный коэффициент определяется по формуле:

$$k_{кал.инж} = \frac{T_{кал}}{T_{кал} - T_{вых} - T_{пр}} = \frac{365}{365 - 104 - 14} = 1,48 \quad (6.6.4)$$

где  $T_{кал}$  – общее количество календарных дней в году;  $T_{вых}$  – общее количество выходных дней в году;  $T_{пр}$  – общее количество праздничных дней в году.

Расчеты временных показателей проведения научного исследования обобщены в таблице 6.9.

Таблица 6.9 – Временные показатели проведения научного исследования

Название работы	Трудоёмкость работ						Длительность работ в рабочих днях $T_{pi}$	Длительность работ в календарных днях $T_{ki}$
	$t_{min}$ , чел-дни		$t_{max}$ , чел-дни		$t_{ожс}$ , чел-дни			
	Исп.1	Исп.2	Исп.1	Исп.2	Исп.1	Исп.2		
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1. Составление и утверждение темы диссертации, утверждение плана-графика	2	-	4	-	2,8	-	2,8	4
2. Календарное планирование выполнения работ	1	3	3	4	1,8	3,4	2,6	4
3. Найдите литературу по высокоэнтропийным керамическим пленкам	-	25	-	35	-	29	29	43
4. Узнайте, как проверить свойства и качество высокоэнтропийных керамических пленок.	-	20	-	30	-	24	24	35
5. Подготовьте тонкопленочные материалы и используйте неактивное магнетронное распыление для получения покрытий $ZrB_2$ , $(Zr, Ti) B_2$ и $(Zr, V, Ti, Ta, Hf) B_2$ .	-	5	-	8	-	6,2	6,2	9
6. Используйте дифракцию рентгеновских лучей Брэгга-Брентано (XRD) с излучением $CuK\alpha$ , чтобы получить пик XRD.	30	60	40	80	34	68	51	75
7. Сканирующий электронный микроскоп (СЭМ) использовался для определения микроструктуры слоев в осажденном и отожженном состояниях.	-	5	-	8	-	6,2	6,2	9
8. Обработка полученных	-	40	-	50	-	44	44	65

данных								
9. Оценка правильности полученных результатов	3	8	5	10	3,8	8,8	6,3	9
10. Составление пояснительной записки		20		40	-	28	28	41
<b>Итого:</b>	36	196	47	255	43	219	201	294

*Примечание:* Исп. 1 – научный руководитель, Исп. 2 – инженер.

На основе таблицы 6.9 составлен календарный план-график выполнения проекта с использованием диаграммы Ганта (таблица 6.10).

Таблица 6.10 – Диаграмма Ганта

№	Виды работ	Исп	$T_{ki}$ кал. дн.	Продолжительность работ												
				Июль - сентябрь			Октябрь - декабрь			январь - март			апрель			
				7	8	9	10	11	12	1	2	3	4			
1	Составление и утверждение тема диссертации, утверждение плана-графика	Исп 1	4													
2	Календарное планирование выполнения работ	Исп 1 Исп 2	4													
3	Найдите литературу по высокоэнтропийным керамическим пленкам	Исп 2	43													
4	Узнайте, как проверить свойства и качество высокоэнтропийных керамических пленок.	Исп 2	35													
5	Подготовьте тонкопленочные материалы и используйте нереактивное магнетронное распыление для получения покрытий ZrB <sub>2</sub> , (Zr, Ti) B <sub>2</sub> и (Zr, V, Ti, Ta, Hf) B <sub>2</sub> .	Исп 2	9													
6	Используйте дифракцию рентгеновских лучей Брэгга-Брентано (XRD) с излучением CuK $\alpha$ , чтобы получить пик XRD.	Исп 1 Исп 2	75													
7	Сканирующий электронный микроскоп (СЭМ) использовался для определения микроструктуры слоев в осажденном и отожженном состояниях.	Исп 2	9													
8	Обработка полученных данных	Исп 2	65													





1	Сканирующий электронный микроскоп	1	5	55	55
<b>Итого</b>		55 тыс. руб.			

Представим расчет потребности в трудовых ресурсах для научных (экспериментальных) работ в таблице 6.13.

Таблица 6.13 – Расчет основной заработной платы исполнителей научных (экспериментальных) работ

Исполнители НИ	$Z_{нк}, руб$	$k_{гр}$	$k_{д}$	$k_p$	$Z_{м}, руб$	$Z_{он}, руб$	$T_p, раб.дн.$	$Z_{осн}, руб$
Руководитель	40000	0,3	0,2	1,3	78000	3265	43	140395
Инженер	30000	0,3	0,2	1,3	58500	3076	219	673644
Итого:								814039

Отметим, что величину расходов по заработной плате определили с учетом трудоемкости выполняемых работ.

Таблица 6.14 – Баланс рабочего времени исполнителей

Показатели рабочего времени	Руководитель	Инженер
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней - выходные дни - праздничные дни	52/14	104/14
Потери рабочего времени - отпуск - невыходы по болезни	48/5	24/10
Действительный годовой фонд рабочего времени	246	213

В состав основной заработной платы включается оплата по окладу, премия, выплачиваемая ежемесячно из фонда заработной платы в размере 30 % от оклада, работников, непосредственно занятых выполнением НИИ

Расчеты были проведены по формулам:

$$Z_{зп} = Z_{осн} + Z_{доп},$$

где  $Z_{\text{осн}}$  – основная заработная плата;  $Z_{\text{доп}}$  – дополнительная заработная плата (12-20 % от  $Z_{\text{осн}}$ ).

Основная заработная плата ( $Z_{\text{осн}}$ ) одного работника рассчитывали по формуле:

$$Z_{\text{осн}} = Z_{\text{дн}} \cdot T_p, \quad (4.7.1)$$

где  $Z_{\text{осн}}$  – основная заработная плата одного работника;  $Z_{\text{дн}}$  – среднедневная заработная плата, руб.;  $T_p$  – продолжительность работ, выполняемых работником, раб.дн.

Среднедневная заработная плата рассчитывается по формуле:

1. Для шестидневной рабочей недели (рабочая неделя руководителя):

$$Z_{\text{дн1}} = \frac{Z_m \times M}{F_d} = \frac{78000 \times 10,3}{246} = 3265 \text{ руб} \quad (4.7.2)$$

где  $Z_m$  – месячный должностной оклад работника, руб.;  $F_d$  – действительный годовой фонд рабочего времени научно-технического персонала, раб. дней;  $M$  – количество месяцев работы без отпуска в течение года:

- при отпуске в 28 раб. дня –  $M = 11,2$  месяца, 5-дневная рабочая неделя;
- при отпуске в 56 раб. дней –  $M = 10,3$  месяца, 6-дневная рабочая неделя.

2. Для пятидневной рабочей недели (рабочая неделя инженера):

$$Z_{\text{дн2}} = \frac{Z_m \times M}{F_d} = \frac{58500 \times 11,2}{213} = 3076 \text{ руб} \quad (4.7.3)$$

Должностной оклад работника за месяц:

– для руководителя:

$$Z_{m1} = Z_{mc1} \times (1 + k_{пр} + k_d) \times k_p = 40000 \times (1 + 0,3 + 0,2) \times 1,3 = 78000 \text{ руб} \quad (4.7.4)$$

– для инженера:

$$Z_{m2} = Z_{mc2} \times (1 + k_{пр} + k_d) \times k_p = 30000 \times (1 + 0,3 + 0,2) \times 1,3 = 58500 \text{ руб} \quad (4.7.5)$$

где  $Z_{mc}$  – заработная плата, согласно тарифной ставке, руб.;  $k_p$  – премиальный коэффициент, равен 0,3;  $k_o$  – коэффициент доплат и надбавок, равен 0,2;  $k_r$  – районный коэффициент, равен 30% (для г. Томска).

Представим расчет дополнительной заработной платы исполнителей темы. Дополнительная заработная плата определяется по формуле:

– для руководителя:

$$Z_{доп1} = k_{доп} \times Z_{осн} = 0,15 \times 140395 = 21059.25 \text{ руб.} \quad (4.7.6)$$

– для инженера:

$$Z_{доп2} = k_{доп} \times Z_{осн} = 0,15 \times 673644 = 101046.6 \text{ руб.}, \quad (4.7.7)$$

где  $k_{доп}$  – коэффициент дополнительной заработной платы (на стадии проектирования принимаем равным 0,15).

Представим расчет отчислений во внебюджетные фонды (страховые отчисления). Отчисления во внебюджетные фонды определяется по формуле:

– для руководителя:

$$Z_{внеб1} = k_{внеб} \times (Z_{осн1} + Z_{доп1}) = 0,3 \times (140395 + 21059.25) = 161454.25 \text{ руб} \quad (4.7.8)$$

– для инженера:

$$Z_{внеб2} = k_{внеб} \times (Z_{осн1} + Z_{доп1}) = 0,3 \times (673644 + 101046.6) = 774690.6 \text{ руб} \quad (4.7.9)$$

где  $k_{внеб}$  – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды (пенсионный фонд, фонд ОМС и социальное страхование). Общая ставка взносов составляет в 2020 году – 30% (ст. 425, 426 НК РФ).

В накладные расходы включены прочие затраты организации, не попавшие в предыдущие статьи расходов: печать и ксерокопирование материалов исследования, оплата услуг связи, электроэнергии, почтовые и телеграфные расходы, размножение материалов. Величина накладных расходов определяется по формуле

$$Z_{накл} = (\text{сумма статей 1÷7}) \cdot k_{нр}, \quad (4.7.10)$$

где  $k_{np}$  – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величина коэффициента принимается равной 0,16.

На основе представленных выше результатов расчета потребности в ресурсах составим бюджет проекта (таблица 6.15).

Таблица 6.15 – Бюджет затрат на проектирование

№	Наименование статьи	Сумма, руб.		
		Т е к у щ и й Проект	Исп.2	Исп.3
1	Материальные затраты НИР	32000	49438,45	21420
2	Затраты на специальное оборудование	9166	5696	16300
3	Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	814039	836853	224048,1
4	Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	122105	107240	485028,4
5	Отчисления во внебюджетные фонды	936144	1505332	631018,1
6	Накладные расходы	306152.64	656075,86	4449054,6
Бюджет затрат НИР		2219606.64	3105483,3	2120560

#### **4.8.Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования**

Интегральный показатель финансовой эффективности научного исследования получен в процессе оценки бюджета затрат трех вариантов

исполнения научного исследования. Для этого наибольший интегральный показатель реализации технической задачи принят за базу расчета (как знаменатель), с которым соотносятся финансовые значения по всем вариантам исполнения.

Интегральный финансовый показатель разработки рассчитывается как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{pi}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (4.8.1)$$

где  $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$  – интегральный финансовый показатель разработки;  $\Phi_{pi}$  – стоимость  $i$ -го варианта исполнения;  $\Phi_{\text{max}}$  – максимальная стоимость исполнения.

$$\Phi_{\text{текущ.проект}} = 2219606.64 \text{ руб.}, \Phi_{\text{исп.1}} = 3105483,3 \text{ руб.}, \Phi_{\text{исп.2}} = 2120560 \text{ руб.} \quad (4.8.2)$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{текущ.проект}} = \frac{\Phi_{\text{текущ.проект}}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{2219606.64}{3105483,3} = 0,717 \quad (4.8.3)$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.3}} = \frac{\Phi_{\text{исп.3}}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{2120560}{3105483,3} = 0,684 \quad (4.8.4)$$

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.2}} = \frac{\Phi_{\text{исп.2}}}{\Phi_{\text{max}}} = \frac{3105483,3}{3105483,3} = 1 \quad (4.8.5)$$

В результате расчета консолидированных финансовых показателей по трем вариантам разработки вариант 1 (текущий проект) с меньшим перевесом признан считается более приемлемым с точки зрения финансовой эффективности.

Интегральный показатель ресурсоэффективности вариантов выполнения НИР ( $I_{pi}$ ) определен путем сравнительной оценки их характеристик, распределенных с учетом весового коэффициента каждого параметра (таблица 6.16).

Таблица 6.16 – Сравнительная оценка характеристик вариантов НИР

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	Текущий проект	Исп.2	Исп.3
1. Безопасность при использовании установки	0.15	4	4	4
2. Стабильность работы	0,2	5	3	4
3. Технические характеристики	0.25	4	4	4

4. Механические свойства	0,2	4	3	3
5. Материалоёмкость	0.2	5	3	3
ИТОГО	1	4,4	3.4	3.6

Расчет интегрального показателя для разрабатываемого проекта:

$$I_p^{\text{текущ.проект}} = 0,15 \times 4 + 0,2 \times 5 + 0,25 \times 4 + 0,2 \times 4 + 0,2 \times 5 = 4,4$$

$$I_p^{\text{исп.2}} = 0,15 \times 4 + 0,2 \times 3 + 0,25 \times 4 + 0,2 \times 3 + 0,2 \times 3 = 3.4$$

$$I_p^{\text{исп.3}} = 0,15 \times 4 + 0,2 \times 4 + 0,25 \times 4 + 0,2 \times 3 + 0,2 \times 3 = 3.6$$

Интегральный показатель эффективности вариантов исполнения разработки вычисляется на основании показателя ресурсоэффективности и интегрального финансового показателя по формуле:

$$I_{\text{исп.i}} = \frac{I_{p-\text{исп.i}}}{I_{\text{финр.i}}} \quad (4.8.6)$$

$$I_{\text{эф.текущ.проект}} = \frac{I_p^{\text{текущ.проект}}}{I_{\text{финр}}^{\text{текущ.проект}}} = \frac{4,4}{0,717} = 6.14 \quad (4.8.7)$$

$$I_{\text{эф.исп.2}} = \frac{I_p^{\text{исп.2}}}{I_{\text{финр}}^{\text{исп.2}}} = \frac{3.4}{1} = 3.4 \quad (4.8.8)$$

$$I_{\text{эф.исп.3}} = \frac{I_p^{\text{исп.3}}}{I_{\text{финр}}^{\text{исп.3}}} = \frac{3.6}{0,684} = 5.26 \quad (4.8.9)$$

Далее интегральные показатели эффективности каждого варианта НИР сравнивались с интегральными показателями эффективности других вариантов с целью определения сравнительной эффективности проекта (таблица 4.17).

Таблица 4.17 – Сравнительная эффективность разработки

№ п/п	Показатели	Текущий проект	Исп.2	Исп.3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,717	1	0,684
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,4	3.4	3.6
3	Интегральный показатель эффективности	6.14	3.4	5.26
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,56	0,72

Сравнение среднего интегрального показателя сопоставляемых вариантов позволило сделать вывод о том, что наиболее финансово- и ресурсоэффективным является вариант 1 (текущий проект). Наш проект является более эффективным по сравнению с конкурентами.

### **Выводы по разделу**

В результате выполнения целей раздела можно сделать следующие выводы:

1. Результатом анализа конкурентных технических решений является выбор одного из вариантов реализации НИР как наиболее подходящего и оптимального по сравнению с другими.

2. В ходе планирования для руководителя и инженера был разработан график реализации этапа работ, который позволяет оценивать и планировать рабочее время исполнителей. Определено следующее: общее количество календарных дней для выполнения работ составляет 294 день; общее количество дней, в течение которых работал инженер, составляет 219 дней; общее количество дней, в течение которых работал руководитель, составляет 43 дней.

3. Для оценки затрат на реализацию проекта разработан проектный бюджет, который составляет 2219606.64 руб.

4. Результат оценки эффективности ИР показывает следующие выводы:

1) значение интегрального финансового показателя ИР составляет 0,717, что является показателем того, что ИР является финансово выгодной по сравнению с аналогами;

2) значение интегрального показателя ресурсоэффективности ИР составляет 4,4, по сравнению с 3,4 и 3,6;

3) значение интегрального показателя эффективности ИР составляет 6,14 по сравнению с 3,4 и 5,26 и является наиболее высоким, что означает, что техническое решение, рассматриваемое в ИР, является наиболее эффективным вариантом исполнения.



## ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

<b>Группа</b>	<b>ФИО</b>
154Б71	Юй Яо

<b>Школа</b>	Новых производственных технологий	<b>Отделение (НОЦ)</b>	Материаловедение
<b>Уровень образования</b>	Бакалавриат	<b>Направление/специальность</b>	22.03.01 Материаловедение и технологии материалов

**Тема дипломной работы:** «Изучение микроструктуры керамических материалов, стабилизированных энтропией»

### Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

<ul style="list-style-type: none"> <li>Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения)</li> </ul> <p><b>Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства;</li> <li>организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.</li> </ul>	<p>Объект исследования - высокоэнтропийная керамика. Этот материал может использоваться в литий-ионных батареях, катализаторах, теплоизоляционных материалах и т. Д.</p> <p>-Трудовой кодекс Российской Федерации от 30 декабря 2001 г. N 197-ФЗ.</p> <p>-ГОСТ 12.1.005-88; Общие гигиенические требования к воздуху в рабочей зоне.</p> <p>-ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место сидя и работа. Общие эргономические требования.</p> <p>-ГОСТ 22614-77. Система "человек-машина". Включение и выключение клавиш и кнопок. Общие эргономические требования.</p> <p>-ТОИ Р-200-23-95. Основная профессиональная охрана труда</p>
---	---

### Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

<p><b>1. Производственная безопасность</b></p> <p><b>Анализ показателей шума и вибрации</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>установление соответствие показателей нормативному требованию;</li> </ul> <p><b>Анализ показателей микроклимата</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>показатели температурные, скорости движения воздуха, запыленности.</li> </ul> <p><b>Анализ освещенности рабочей зоны</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>типы ламп, их количество, соответствие нормативному требованию освещенности;</li> <li>при расчете освещения указать схему размещения светильников на потолке согласно проведенному расчету.</li> </ul> <p><b>Анализ электробезопасности</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>наличие электроисточников, характер их опасности;</li> <li>установление класса электроопасности помещения, а также безопасные номиналы тока, напряжения, сопротивления заземления.</li> <li>при расчете заземления указать схему размещения заземлителя согласно проведенному расчету.</li> </ul> <p><b>Анализ пожарной безопасности</b></p>	<ol style="list-style-type: none"> <li>Отклонение показателей микроклимата</li> <li>Запылённость.</li> <li>Уровень шума.</li> <li>Отсутствие или недостаток естественного света.</li> <li>Не достаточная освещённость рабочей зоны.</li> <li>Пожар.</li> <li>Электробезопасность</li> </ol>
---	---

<ul style="list-style-type: none"> <li>• присутствие горючих материалов, тем самым, присутствие повышенной степени пожароопасности.</li> <li>• категории пожароопасности помещения, марки огнетушителей, их назначение.</li> <li>• Разработать схему эвакуации при пожаре.</li> </ul>	
<p><b>2. Экологическая безопасность:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• защита селитебной зоны</li> <li>• анализ воздействия объекта на атмосферу (выбросы);</li> <li>• анализ воздействия объекта на гидросферу (сбросы);</li> <li>• анализ воздействия объекта на литосферу (отходы);</li> <li>• разработать решения по обеспечению экологической безопасности со ссылками на НТД по охране окружающей среды.</li> </ul>	<p>В ходе производственного цикла материала, возможны вредные последствия для окружающей среды. Необходимо учитывать способы создания материала, а также соблюдать баланса качества / негативные последствия.</p>
<p><b>3. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:</b></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• перечень возможных ЧС при разработке и эксплуатации проектируемого решения;</li> <li>• выбор наиболее типичной ЧС;</li> <li>• разработка превентивных мер по предупреждению ЧС;</li> <li>• разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.</li> </ul>	<p>1. Наиболее вероятны пожары и взрывы. В лаборатории приняты профилактические меры, чтобы максимально быстро отреагировать на возможные чрезвычайные ситуации.</p> <p>2. Из-за географического положения лаборатории возможными стихийными бедствиями являются:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>-Сильные ветры и ураганы;</li> <li>-наводнение;</li> <li>-Сильный дождь (град, сильный туман)</li> </ul> <p>Эта аварийная ситуация может замедлить или временно приостановить лабораторные работы.</p>

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	26.02.21 г.
--	-------------

**Задание выдал консультант:**

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ТПУ	Сечин Александр Иванович	Д.т.н.		26.02.21 г.

**Задание принял к исполнению студент:**

Группа	ФИО	Подпись	Дата
154Б71	Юй Яо		26.02.21 г.

## **7. Социальная ответственность**

### **Введение**

Обеспечение безопасности жизни и здоровья работников в процессе работы - один из национальных приоритетов защиты человеческого капитала. Для решения задач улучшения условий и безопасности труда, промышленной и экологической безопасности внедряется специальная система оценки условий труда. Совершенствуются системы и методы предварительных медицинских осмотров (осмотров) работников, работающих во вредных и опасных условиях труда, совершенствуются системы обеспечения работников современными средствами индивидуальной защиты.

Тема дипломной работы - Исследование структуры и свойств высокоэнтропийной керамики. Объектами исследования являются высокоэнтропийной керамики.

Целью данной работы является анализ структуры высокоэнтропийной керамики с помощью электронной микроскопии (SEM) и (EDX) карт спектрального состава. И с помощью различных инструментов для проверки работоспособности высокоэнтропийной керамики.

Целью раздела «Социальная ответственность» является определение вредных и опасных факторов в трудовом процессе, способы предотвращения их вредного воздействия, а также определение поведения в чрезвычайных ситуациях. Для достижения этой цели необходимо решить следующие задачи:

- 1) Правовые и организационные вопросы безопасности;
- 2) Выявить вредные и опасные факторы;
- 3) Экологическая безопасность;
- 4) Безопасность в экстренных ситуациях

### **7.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности**

При производстве необходимо соблюдать требования Трудового кодекса Российской Федерации от 30 декабря 2001 г. N 197-ФЗ (с изменениями с 1 апреля 2019 г.). Режим рабочего времени и продолжительность рабочей недели

(два выходных дня в течение пяти дней и один выходной в течение шести дней) должны строго соответствовать статье 100 Закона о труде Российской Федерации. В целях защиты персональных данных сотрудников работодатели обязаны соблюдать статью 86 Закона о труде Российской Федерации при обработке персональных данных сотрудников. Согласно статье 117 Закона Российской Федерации о труде работникам, работающим с вредными и / или опасными условиями труда, предоставляется дополнительный оплачиваемый ежегодный отпуск и регулярные медицинские осмотры (осмотры).

Рабочее место сидя-рабочее организовано для легкой работы, не требующей свободного передвижения рабочих, и подходит для работы средней интенсивности в связи с особенностями технологического процесса. Категория работ - по ГОСТ 12.1.005-88. В связи с необходимостью подолгу сидеть и работать рабочее место лаборатории максимально приближено к требованиям ГОСТ 12.2.032-78. Конструкция рабочего места и взаимное расположение всех элементов (сиденья, органы управления, информационные выставочные средства и др.) должны соответствовать требованиям ГОСТ 12.2.032-78. Антропометрические, физические и психологические требования и характер работы. Во избежание несчастных случаев обучение следует проводить по ГОСТ 12.0.004-90 и проверять знания рабочих. Организуйте обучение по охране труда.

Работа инженера - это тонкая работа, которая сопровождается огромным умственным напряжением и нервозностью. Если вы работаете в помещении с плохой вентиляцией, высокой температурой или низкой температурой и влажностью, а также недостаточным освещением в течение длительного времени, это отрицательно скажется на здоровье рабочих и неизбежно приведет к снижению производительности труда. Поэтому при проектировании рабочего места следует учитывать освещенность, температуру, влажность, давление, шум, наличие вредных веществ, электромагнитных полей и другие гигиенические и гигиенические требования организации рабочего места.

Для комфортной работы в лаборатории согласно Трудовому законодательству РФ необходимо место на полу, отведенное для душевного расслабления (комната отдыха), и специально отведенная комната для курения. Рассматриваемая рабочая лаборатория не имеет комнат отдыха и курилок, для повышения морального духа рабочих необходимо организовать эти помещения.

## 7.2. Производственная безопасность

В данном пункте проанализированы вредные и опасные факторы, которые могут возникать при проведении исследований в лаборатории, при разработке или эксплуатации проектируемого решения. Для идентификации потенциальных факторов использовался ГОСТ 12.0.003-2015 «Опасные и вредные производственные факторы. Классификация». Перечень опасных и вредных факторов, характерных для проектируемой производственной среды, представлен в таблице 7.1.

Таблица 7.1 – Возможные вредные и опасные факторы

Факторы (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ			Нормативные документы
	Разр абот ка	Изго товл ение	Экс плу атац ия	
1. Отклонение показателей микроклимата	+	+	-	СанПиН 2.2.4-548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
2. Запылённость.	–	+	+	
3. Уровень шума.	–	+	–	ГОСТ 12.1.003–2014 ССБТ. Шум. Общие требования безопасности. ГОСТ Р 12.1.019-2017 ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
4. Отсутствие или недостаток естественного света.	+	+	+	
5. Не достаточная освещённость рабочей зоны.	+	+	+	СП 52.13330.2016. Естественное и

6. Пожар.	+	+	+	искусственное освещение. Актуализированная редакция
7. Электробезопасность	+	+	+	ГОСТ 12.1.005-88 ССБТ. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны.
				ГОСТ 12.1.030-81 ССБТ. Электробезопасность. Защитное заземление, зануление.

### 7.2.1. Анализ вредных факторов

#### *Отклонение показателя микроклимата*

Источником таких вредных факторов могут быть изменения погодных условий, периодичности и продолжительности вентиляции помещения, а также правильная работа системы отопления. Этот фактор классифицируется как физическая опасность. Длительная работа в плохо вентилируемых, высокотемпературных или низкотемпературных помещениях отрицательно скажется на здоровье рабочих и неизбежно приведет к снижению производительности труда. Для создания в помещениях оптимальных значений микроклимата системы отопления, вентиляции и кондиционирования должны соответствовать СНиП 41-01-2003.

#### *Запылённость*

Источником этого вредного фактора является сырьевой порошок, используемый для производства высокоэнтропийной керамики. Этот фактор классифицируется как физическая опасность. Когда пыль порошковых материалов (наночастиц) попадает в дыхательные пути, это вызывает респираторные заболевания и увеличивает вероятность внутренних травм, аллергии и раздражения. Для предотвращения попадания вредных веществ в организм сотрудникам рекомендуется использовать средства индивидуальной защиты. К средствам индивидуальной защиты относятся:

- Респиратор, противогаз;
- Очки;

- перчатки;
- Специальная пыленепроницаемая одежда;
- Защитные мази и мази.

#### *Уровень шума.*

Источником таких вредных факторов могут быть шаровые мельницы и твердомеры. Длительное воздействие шума на сотрудников может привести к депрессивному психическому состоянию и снижению производительности. Также может возникнуть неврит слухового нерва. Этот фактор классифицируется как физическая опасность. Согласно ГОСТ 12.1.003–2014 ССБТ этот вид работ отнесен к научной деятельности, уровень шума не должен превышать 86 дБ, а частота не должна превышать 32 Гц. Согласно РП 2.2.2006-05, рассматриваемым видом деятельности является умственная нагрузка. В рабочем процессе выполнить задание согласно инструкции, соответствующее среднему напряжению. Уровень шума действующей лаборатории не будет превышать установленный ГОСТом предел.

#### *Отсутствие или недостаток естественного света*

Это потому, что лаборатория находится в подвале. Недостаток естественного света может вызвать нарушение циркадного ритма, бессонницу и другие проблемы со здоровьем. Этот фактор классифицируется как физическая опасность. В лаборатории следует устроить перерыв, а экспериментаторы по очереди выходят на улицу, чтобы погреться на солнышке.

#### *Не достаточная освещённость рабочей зоны*

Источником этого фактора является искусственное освещение. Недостаток света увеличивает зрительное напряжение и увеличивает зрительную усталость. Также это приводит к развитию глазных болезней. Этот фактор классифицируется как физическая опасность. Хорошее освещение в комнате очень важно для понимания структуры материала. Лаборатория должна быть хорошо освещена, а закрытое помещение может быть освещено боковым искусственным или частичным освещением с одной стороны. Согласно СанПиН 2.2.1/2.1.1.1278–03 и СНиП 23–05–95 визуальная работа

очень точная, визуальная работа - II класс, а лучшая освещенность - 400 люкс (общая система освещения). Данная спецификация полностью реализована в рабочей лаборатории.

### **7.2.2. Анализ опасных факторов**

#### *Пожар*

Источником этого фактора могут быть короткое замыкание проводов и случайные ошибки персонала. Этот фактор представляет собой физическую опасность. Согласно Федеральному закону № 123-ФЗ («Технический регламент о требованиях пожарной безопасности»).

Статья 52 Для защиты людей и имущества от опасностей возгорания лаборатория приняла следующие меры, обеспечивающие защиту персонала и их ограждений от возможных опасностей:

- 1) Использовать пространственно-планировочные решения и методы, чтобы ограничить распространение огня за пределы печи;
- 2) Создать маршрут эвакуации, отвечающий требованиям безопасной эвакуации персонала в случае пожара;
- 3) Установка системы обнаружения пожара (устройство и система пожарной сигнализации), оповещения и управления эвакуацией при пожаре;
- 4) Использование основных методов пожаротушения;

#### *Электробезопасность*

Электробезопасность - это система организационно-технических мероприятий и средств защиты людей от вредного и опасного воздействия электрического тока. Источником этого фактора является использование электроприборов. Этот фактор считается физической опасностью. Согласно ГОСТ 12.1.030–81 все оборудование укомплектовано: изоляцией, заземлением металлической оболочки. Лабораторная площадка относится к первой категории по условиям опасности поражения электрическим током, отсутствует опасность поражения электрическим током, отсутствуют условия повышенной или особой опасности.

### **7.3. Экологическая безопасность**



Целью данной работы является изготовление многих видов высокоэнтропийной керамики. Созданные энтропийно стабильные керамические материалы могут быть использованы в литий-ионных батареях, электронной керамике и теплоизоляционных материалах.

Одним из вредных факторов, которые могут нанести окружающей среде в процессе производства композитных материалов, является загрязнение окружающей среды пылью в процессе подготовки.

#### *Защита атмосферы*

Ограниченный размер атмосферы делает ее очень чувствительной к локальному, региональному и глобальному загрязнению. Технический контроль на производстве осуществляется с помощью оборудования, предотвращающего попадание дисперсных частиц в воздух рабочей зоны, и оборудования, удаляющего эти частицы из воздуха рабочей зоны. Метод контроля должен иметь диапазон чувствительности ( $\sim 5$  мкм) не ниже нижнего предела.

К средствам защиты атмосферы от выбросов относятся: удаление примесей с помощью специального оборудования, такого как циклонный сепаратор, улавливающий частицы размером более 5 микрон с эффективностью до 0,95. Применение системы местной вытяжной вентиляции со встроенным вентилятором в вытяжном шкафу. Эффективность сбора должна быть достаточно высокой.

#### *Защита гидросферы*

Основная причина сточных вод, образующихся в этом эксперименте, связана с очисткой экспериментального оборудования. Большинство лабораторных экспериментов проводится с использованием сухого порошка без жидких примесей. Не выбрасывайте отходы в канализацию. Если наночастицы попадают в воду, их концентрация незначительна и не повлияет на здоровье человека.

#### *Защитите литосферу*

Попадая в литосферу, порошкообразные материалы могут изменять микробную и ферментативную активность почвы и активно взаимодействовать с организмами, живущими в этой среде. Обращение с отходами должно осуществляться в соответствии с «Санитарными правилами накопления, транспортирования, размещения и утилизации токсичных промышленных отходов» (N 8180-84 от 28.12.84). Твердые отходы и порошковая система собираются в специальный сборник и вывозятся на переработку.

#### **7.4. Аварийная безопасность**

Одна из возможных аварийных ситуаций в рабочей лаборатории - факторы пожара и взрыва. Основными причинами возникновения этой аварийной ситуации могут быть электрические короткие замыкания, неправильное обращение с открытым огнем и неправильное хранение легковоспламеняющихся и взрывоопасных материалов. Согласно Стандарту безопасности труда ГОСТ Р 12.1.019-2017, в лабораториях приняты профилактические меры, чтобы иметь возможность как можно быстрее реагировать на возможные чрезвычайные ситуации. Одежда и средства индивидуальной защиты - Лаборатория должна иметь достаточное количество чистящей и защитной одежды (например, защитную одежду) в соответствии с уровнем риска для персонала лаборатории и посетителей. Средства пожаротушения - В лаборатории установлены два порошковых порошковых огнетушителя ОП-5, в здании есть охранная и пожарная сигнализация, ящик с сухим песком и лопата. По ГОСТ Р 12.4.026-2001 область должна быть выделена красным цветом. В каждой мастерской есть план эвакуации из здания. Если пожар невозможно остановить или предотвратить, пожалуйста, покиньте здание как можно скорее.

Следующая чрезвычайная ситуация - стихийное бедствие

Наиболее вероятными стихийными бедствиями в Томской области являются:

- Сильные ветры и ураганы;
- Наводнение;

-Сильный дождь (град, сильный туман).

Министерство по чрезвычайным ситуациям Томской области несет ответственность за предотвращение возможных чрезвычайных ситуаций и ликвидацию их последствий. Чтобы получать самую свежую информацию от управления гражданской обороны, лучше всего использовать радиоприемник с батарейным питанием: скорее всего, когда начнется смерч, питание отключится, и нужно обратить внимание на информацию от гражданской обороны и аварийный штаб каждую минуту. Идите в эвакуационное убежище.

В разделе ВКР «Социальная ответственность», был произведён анализ рабочего места во время исследовательской работы, а также:

- Рассмотрены правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности;
- Обнаружены и подробно проанализированы возможные вредные и опасные факторы на рабочем месте;
- Проведён анализ возможного вредного воздействия исследования на экологию и способы защиты атмосферы, гидросферы и литосферы;
- Рассмотрены возможные чрезвычайные ситуации на рабочем месте. Проанализировано поведение работника при различных чрезвычайных ситуациях.

### **Выводы по разделу**

В этой части дипломного проекта анализируются опасности, вредные факторы и чрезвычайные ситуации, возникающие при производстве и испытании высокоэнтропийной керамики. К вредным факторам относятся: повышение уровня шума на рабочем месте; недостаточное освещение рабочей зоны; отклонение показателей микроклимата в помещении. И нашел решение соответственно.

Разработаны меры безопасности по предотвращению травм и ожогов, применены электроизоляционные устройства, разработаны меры пожарной безопасности. В соответствии с требованиями охраны окружающей среды приняты защитные меры для атмосферы, гидросферы и литосферы. При

соблюдении всех необходимых мер безопасности, включая соблюдение требований организации рабочего места, оборудование может эксплуатироваться с минимальным риском для здоровья человека.

## Заключение

Таким образом, в ходе выполнения работы получен керамический твердый раствор (Zr, Hf, Nb)C методом горячего прессования при температуре 2000 °С.

Показано, что структура (Zr, Hf, Nb)C была представлена кубической гранецентрированной решеткой (пространственная группа  $O_h^5 - Fm3m$ ) с параметрами решетки 0,4599 нм.

Относительная плотность образцов керамики (Zr,Hf,Nb)C составила 0,87. В процессе получения на полированной поверхности наблюдается остаточная пористость, величина которой не превышает 10 %.

Согласно проведенному элементному анализу, на поверхности керамики наблюдалось равномерное распределение элементов

Твердость керамики (Zr, Hf, Nb)C составила 25,7 ГПа. Экспериментальное значение твердости керамики выше величины, рассчитанной по правилу смеси.

## Список литературы

- 1) Rost, C. M. et al. Entropy-stabilized oxides // Nature Communications: A. - 2015. - Т. 6. - P. 84-85, <https://www.nature.com/articles/ncomms9485>
- 2) Yeh, J.-W. et al. Nanostructured high-entropy alloys with multiple principle elements: novel alloy design concepts and outcomes // Advanced Engineering Materials: A. - 2004. - Т. 6. - №. 5. - P. 299-303, <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/adem.200300567>
- 3) Gao, M. C. et al. Computational modeling of high-entropy alloys: structures, thermodynamics and elasticity // Journal of Materials Research: A. - 2017. - Т. 32. - P. 19-25, <https://www.osti.gov/biblio/1439970>
- 4) Gild, J. et al. High-entropy metal diborides: a new class of high-entropy materials and a new type of ultrahigh temperature ceramics // Scientific Reports: A. - 2016. - Т. 6. - P. 100-105, <https://www.nature.com/articles/srep37946>
- 5) Sarker, P. et al. High-entropy high-hardness metal carbides discovered by entropy descriptors. // Nature Communications: A. - 2018. - Т. 6. - P. 55-61, <https://www.nature.com/articles/s41467-018-07160-7>
- 6) Castle, E., Csanádi, T., Grasso, S., Dusza, J., Reece, M. J. Processing and properties of high-entropy ultra-high temperature carbides // Scientific Reports: A. - 2018. - Т. 8. - P. 86-90, <https://www.nature.com/articles/s41598-018-26827-1>
- 7) Yan, X. et al. (Hf<sub>0.2</sub>Zr<sub>0.2</sub>Ta<sub>0.2</sub>Nb<sub>0.2</sub>Ti<sub>0.2</sub>)C high-entropy ceramics with low thermal conductivity // Journal of the American Ceramic Society: A. - 2018. - Т. 101. - №. 10. - P. 4486-4491, <https://doi.org/10.1111/jace.15779>
- 8) Jin, T. et al. Mechanochemical-assisted synthesis of high-entropy metal nitride via a soft urea strategy // Advanced Materials: A. - 2018. - Т. 30. - №. 23. - P. 213-221, <https://doi.org/10.1002/adma.201707512>

- 9) Gild, J. et al. A high-entropy silicide:  $(\text{Mo}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{Ti}_{0.2}\text{W}_{0.2})\text{Si}_2$  // Journal of Materiomics: A. - 2019. - T. 5. - №. 3. - P. 337-343, <https://doi.org/10.1016/j.jmat.2019.03.002>
- 10) Qin, Y. et al. A high entropy silicide by reactive spark plasma sintering // Journal of Advanced Ceramics: A. - 2019. - T. 8. - P. 148-152, <https://link.springer.com/article/10.1007/s40145-019-0319-3>
- 11) Tsai, M. Yeh, J. High-entropy alloys: a critical review // Materials Research letters: A. - 2014. - T. 2. - №. 3. - P. 107-123, <https://doi.org/10.1080/21663831.2014.912690>
- 12) Miracle, D. B. High-entropy alloys: a current evaluation of founding ideas and core effects and exploring nonlinear alloys // JOM: A. - 2017. - T. 69. - P. 2130-2136, <https://link.springer.com/article/10.1007/s11837-017-2527-z>
- 13) Grzesik, Z. et al. Defect structure and transport properties in  $(\text{CoCuMgNiZn})\text{O}$  high entropy oxide // Journal of the European Ceramic Society: A. - 2019. - T. 39. - №. 14. - P. 4292-4298, <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2019.06.018>
- 14) Miracle, D. B. & Senkov, O. N. A critical review of high entropy alloys and related concepts // Acta Materialia : A. - 2017. - T. 122. - P. 448-511, <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2016.08.081>
- 15) Sarkar, A. et al. Rare earth and transition metal based entropy stabilised perovskite type oxides // Journal of the European Ceramic Society: A. - 2018. - T. 38. - №. 5. - P. 2318-2327, <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2017.12.058>
- 16) Dong, Y. et al. High-entropy environmental barrier coating for the ceramic matrix composites // Journal of the European Ceramic Society: A. - 2019. - T. 39. - №. 7. - P. 2574-2579, <https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2019.02.022>
- 17) Chen, J. et al. Stability and compressibility of cation-doped high-entropy oxide  $(\text{MgCoNiCuZn})\text{O}_5$ . Journal of Physical Chemistry C: A. - 2019. - T. 123. - №. 29. - P. 1765-1774, <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jpcc.9b04992>

- 18) Chen, H. et al. High porosity and low thermal conductivity high entropy  $(\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Ti}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ta}_{0.2})\text{C}$  // Journal of Materials Science Technology: A. - 2019. - T. 5. - №. 8. - P. 1700-1705, <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2019.04.006>
- 19) Vladescu, A. et al. In vitro biocompatibility of Si alloyed multi-principal element carbide coatings // PLOS ONE: A. - 2018. - T. 13. - P. 171-187, <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0161151>
- 20) Zhou, J. et al. High-entropy carbide: a novel class of multicomponent ceramics // Ceramics International: A. - 2018. - T. 44. - №. 17. - P. 22014-22018, <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2018.08.100>
- 21) Sarkar, A. et al. High entropy oxides for reversible energy storage // Nature Communications: A. - 2018. - T. 9. - P. 2004-2018, <https://www.nature.com/articles/s41467-018-05774-5>
- 22) Zheng, Y. et al. A high-entropy metal oxide as chemical anchor of polysulfide for lithium-sulfur batteries // Energy Storage Mater: A. - 2019. - T. 22. - P. 678-683, <https://doi.org/10.1016/j.ensm.2019.02.030>
- 23) Wang, Q. et al. Multi-anionic and cationic compounds: new high entropy // Energy Environ Sci: A. - 2019. - T. 12. - P. 2433-2442, <https://pubs.rsc.org/en/content/articlehtml/2019/ee/c9ee00368a>
- 24) Hsieh, M.-H., Tsai, M.-H., Shen, W.-J. & Yeh, J.-W. Structure and properties of two Al–Cr–Nb–Si–Ti high-entropy nitride coatings // Surface and Coatings Technology: A. - 2013. - T. 221. - P. 118-123, <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2013.01.036>
- 25) Braun, J. L. et al. Charge-induced disorder controls the thermal conductivity of entropy-stabilized oxides // Advanced Materials: A. - 2018. - T. 30.- №. 51. - P. 314-324, <https://doi.org/10.1002/adma.201805004>
- 26) Harrington, T. J. et al. Phase stability and mechanical properties of novel high entropy transition metal carbides // Acta Materialia: A. - 2019. - T. 166. - P. 271-280, <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.12.054>



- 27) Friedrich, R. et al. Coordination corrected ab initio formation enthalpies. *npj Comput* // *npj Computational Materials: A.* - 2019. - T. 5. - P. 27-35, <https://www.nature.com/articles/s41524-019-0192-1>
- 28) Toher, C., Oses, C., Hicks, D. & Curtarolo, S. Unavoidable disorder and entropy in multi-component systems // *npj Computational Materials: A.* - 2019. - T. 5. - P. 60-75, <https://www.nature.com/articles/s41524-019-0206-z>
- 29) van de Walle, A. Multicomponent multisublattice alloys, nonconfigurational entropy and other additions to the alloy theoretic automated toolkit // *Calphad: A.* - 2009. - T. 33.- №. 2. - P. 266-278, <https://doi.org/10.1016/j.calphad.2008.12.005>
- 30) Lederer, Y., Toher, C., Vecchio, K. S. & Curtarolo, S. The search for high entropy alloys: a high-throughput ab-initio approach // *Acta Materialia: A.* - 2018. - T. 159.- №. 15. - P. 364-383, <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.07.042>
- 31) Chen, T.-K., Shun, T. T., Yeh, J.-W. & Wong, M. S. Nanostructured nitride films of multi-element high-entropy alloys by reactive DC sputtering // *Surface and Coatings Technology: A.* - 2004. - T. 188-189. - P. 193-200, <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2004.08.023>
- 32) Chen, T.-K., Wong, M.-S., Shun, T.-T. & Yeh, J.-W. Nanostructured nitride films of multi-element high-entropy alloys by reactive DC sputtering // *Surface and Coatings Technology: A.* - 2005. - T. 200.- №. 5-6. - P. 1361-1365, <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2005.08.081>
- 33) Chen, T.-K. & Wong, M.-S. Structure and properties of reactively-sputtered  $Al_xCoCrCuFeNi$  oxide films // *Thin Solid Films: A.* - 2007. - T. 516.- №. 2-4. - P. 141-146, <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2007.06.142>
- 34) Anand, G., Wynn, A. P., Handley, C. M. Freeman, C. L. Phase stability and distortion in high-entropy oxides // *Acta Materialia: A.* - 2018. - T. 146. - P. 119-125, <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2017.12.037>

- 35) Zunger, A., Wei, S.-H., Ferreira, L. G. & Bernard, J. E. Special quasirandom structures // *Physics Rev : A* - 1990. - Т. 65. - Р. 353-364, <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.65.353>
- 36) Микульский В. Г. и др. Строительные материалы // Часть II – М.: Издательство Ассоциации строительных вузов : А. - 2009. - Р. 536, [https://www.studmed.ru/mikulskiy-vg-i-dr-stroitelnye-materialy-materialovedenie-chast-ii\\_5161919fc30.html](https://www.studmed.ru/mikulskiy-vg-i-dr-stroitelnye-materialy-materialovedenie-chast-ii_5161919fc30.html)
- 37) Golla B. R. et al. Review on ultra-high temperature boride ceramics // *Progress in Materials Science* : А. - 2020. - Т. 111. - С. 100651. <http://eprints.iisc.ac.in/64626/>