Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0821U100688

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-04-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Медюх Назарій Романович

2. Mediukh Nazarii Romanovytch

Кваліфікація: 105

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 105

Назва наукової спеціальності: Прикладна фізика та наноматеріали

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 20-04-2021

Спеціальність за освітою: Фізика ядра та фізика високих енергій

Місце роботи здобувача: Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Кржижановського, буд. 3, м. Київ, Київська обл., 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 26.207.001

Повне найменування юридичної особи: Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Кржижановського, буд. 3, м. Київ, Київська обл., 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Кржижановського, буд. 3, м. Київ, Київська обл., 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 53.49.05, 29.19

Тема дисертації:

1. Стабільність та властивості твердих розчинів на основі боридів і карбідів перехідних металів та карбіду кремнію: першопринципні дослідження

2. Stability and properties of solid solutions based on borides and carbides of transition metals and silicon carbide: first-principle research.

Реферат/анотація:

1. В роботі проводили скалярно-релятивістські обчислення зонної структури для обраних упорядкованих і неупорядкованих суперкомірок, використовуючи Quantum-ESPRESSO код, побудований на методі функціоналу густини. Для твердих розчинів Ti1-xNbxB2 та Ti1-xZrxB2 було встановлено, що при T=0 K Ti1-xNbxB2 є стабільними (негативна енергія змішування), тоді як Ti1-xZrxB2 є термодинамічно нестійким (позитивна енергія змішування). Отримані негативні значення енергії змішування для всіх складів Ti1-xNbxB2 вказують на можливість утворення стабільних неперервних твердих розчинів заміщення. Встановлено, що причиною зміцнення твердих розчинів Ti1-xNbxB2 є посилення міжатомної взаємодії між xy-площинами в z-напрямку. Це підтверджується розрахунками парціальних щільностей електронних станів і парціальних

зарядів, які показують збільшення заряду на pz орбіталях атомів бору у порівнянні з px та py орбіталями для складів близьких до еквіатомних. Передбачається, що зі зниженням температури до критичної 1973 K тверді розчини Ti1-xZrxB2 розпадатимуться відповідно до спінодального чи бінодального механізмів. Врахування фононної компоненти зменшує критичну температуру розпаду. Вивчення механічних властивостей Ti1-xNbxB2 та Ti1-xZrxB2 показало, що вони не корелюють зі стабільністю твердих розчинів і змінюються практично лінійно залежно від їхнього складу. Для встановлення можливих шляхів переходу B1-SiC в B3-SiC при декомпресії була застосована першопринципна молекулярна динаміка (FPMD). Проміжні стани аналізували на наявність симетрії за допомогою теоретико-групового підходу та аналізу фононних спектрів. Показано, що шлях переходу залежить від розміру та конфігурації початкових комірок, температур моделювання та наявності м'яких фононних мод, вимерзання яких призводить до структурної трансформації. Ми знайшли два можливих шляхи для перетворення з B1 в 3C структуру: Fm3m -- Imm2 -- I4m2 -- F43m Fm3m -- I4mm -- Cc -- F43m Задля визначення механічних та термодинамічних характеристик та стабільності твердих розчинів TiC-SiC та NbC-SiC були проведені відповідні першопринципні розрахунки. Розрахована енергія змішування має позитивні значення для обох систем, а значить, утворення твердих розчинів при низьких температурах є енергетично невигідним. Задля визначення стабільності твердих розчинів при скінченних температурах нами були побудовані спінодальні та бінодальні криві з врахуванням фононної та конфігураційної компонент. Для системи Ti1-xSixC розглядались структури B1 та B3, оскільки карбід титану є стабільним у B1 структурі, а карбід кремнію -- у B3. Показано, що структура B1 є енергетично вигідною в діапазоні 0 <= x <0.5, тоді як структура B3 -- в діапазоні 0.5 <= x < 1.0. Аналогічні обчислення для сплавів Nb1-xSixC показали, що вони є динамічно нестабільними на широкому проміжку концентрацій. Попри те, що обидві системи TiC-HfC і TiC-TaC показують позитивне відхилення об'єму від лінійності, TiC-HfC система є нестабільною, тоді як TiC-TaC система є стабільною. Дослідження механічних властивостей показало, що модулі пружності та твердості для TiC-HfC мають негативне відхилення від лінійності, тоді як для TiC-TaC -- позитивне. Для вивчення причин зміцнення твердих розчинів TiC-TaC та нестабільності TiC-HfC проведено аналіз їх електронної структури. Показано, що зміцнення в основному спричинене внеском металічної складової хімічного зв'язку, тоді як енергетична нестабільність сплавів TiC-HfC обумовлена, головним чином, різницею між об'ємами комірок TiC та HfC. Був проведений аналіз стабільності всіх можливих комбінацій твердих розчинів на основі карбідів перехідних металів IV, V та частково VI груп. Показано, що всі сплави на основі карбідів ПМ різних груп є розчинними, за винятком ZrC-VC та HfC-VC, що пояснюється великою різницею між об'ємами комірок карбідів, з яких вони складаються. Показано, що енергія змішування залежить в основному від різниці об’ємів кінцевих карбідів та різниці зайнятості металевої смуги в них. Проведені розрахунки показують, що максимальна твердість карбідних сплавів має бути для композицій з кількістю валентних електронів рівним 8.5--8.75. Розроблена методика дослідження, а також отримані результати можна застосовувати для пояснення фазових переходів, механізмів зміцнення та для передбачення механічних і термодинамічних властивостей інших твердих розчинів. Вивчені нами властивості тугоплавких сплавів на основі боридів і карбідів перехідних металів та SiC можуть бути корисними при проєктуванні нових надтвердих матеріалів.

2. Scalar-relativistic calculations of the band structure for selected ordered and disordered supercells have been performed using Quantum-ESPRESSO code based on the density functional method. For the solid solutions Ti1-xNbxB2 and Ti1-xZrxB2, it was found that at T=0 K the Ti1-xNbxB2 solutions are thermodynamically stable (negative mixing energy), while Ti1-xZrxB2 ones are unstable (positive mixing energy). The obtained negative values of mixing energy for all Ti1-xNbxB2 solutions indicate the possibility of formation of stable continuous substitutional solid solutions. It was established that the reason for their strengthening is strengthening of the interatomic interaction between the xy-planes in the z-direction. That is confirmed by calculations of the partial densities of electronic states and partial charges, which show an increase in the charge on the pz orbitals of boron atoms as compared to the px and py orbitals for compositions close to equiatomic. With temperature decreasing down to the critical 1973 K, the Ti1-xZrxB2 solid solutions are assumed to decompose according to the spinodal or binodal mechanisms. Taking the phonon component into account reduces the critical temperature of

decomposition. The study of mechanical properties of Ti1-xNbxB2 and Ti1-xZrxB2 has shown that they do not correlate with the stability of the solid solutions and change almost linearly depending on their composition. To establish possible routes for the structural transition from B1-SiC to B3-SiC under decompression, first-principles molecular dynamics (FPMD) was used. Intermediate states were analyzed for the presence of symmetry using a group-theoretic approach and analysis of phonon spectra. The transition route was shown to depend on the volume and configuration of the initial cells, modeling temperature, and the presence of soft phonon modes, freezing of which leads to structural transformation. We have found two possible routes of the B1 to 3C structural transition: Fm3m -- Imm2 -- I4m2 -- F43m Fm3m -- I4mm -- Cc -- F43m In order to determine the mechanical and thermodynamic characteristics and stability of the solid solutions TiC-SiC and NbC-SiC, the corresponding first-principle calculations were performed. The calculated mixing energy is positive for both systems, which means that the formation of solid solutions at low temperatures is energetically unfavorable. To determine stability of solid solutions at finite temperatures, we constructed spinodal and binodal curves taking into account the phonon and configuration components. For the Ti1-xSixC system, the structures B1 and B3 were considered because titanium carbide is stable in the B1 structure, while silicon carbide – in B3. The structure B1 was shown to be energetically favorable in the range $0 <= x <0.5$, while the structure B3 in the range $0.5 <= x <=1.0$. Similar calculations for the Nb1-xSixC system have revealed that they are dynamically unstable over a wide concentration range. Although both TiC-HfC and TiC-TaC systems show a positive deviation of the cell volume from linearity, the TiC-HfC system is unstable, while the TiC-TaC system is stable. The study of mechanical properties revealed that the modulus of elasticity and hardness for TiC-HfC have a negative deviation from linearity, while for TiC-TaC it is positive. To establish the reasons for strengthening of the TiC-TaC solid solutions and instability of TiC-HfC ones, an analysis of their electronic structures was performed. It was shown that the strengthening is mainly caused by the contribution of the metal component of the chemical bond, while the energetic instability of the TiC-HfC solutions is mainly due to the significant difference in the volumes of TiC and HfC cells. Stability of all possible combinations of solid solutions based on transition metals of IV, V and partially VI groups has been analyzed as well. It was shown that all alloys based on transition metal carbides of different groups are mutually soluble, except for ZrC-VC and HfC-VC, which have large difference in the cell volumes of carbides they consist of. Thus, the mixing energy depends mainly on the difference in the cell volumes of the composing carbides and the difference in filling of the energetic metal bands in them. The corresponding calculations show that the maximum strength of such carbide compositions is expected for the number of valence electrons within 8.50--8.75. The developed research methodology as well as the obtained results will be useful for interpretation of phase transitions and strengthening mechanisms and prediction of mechanical and thermodynamic properties for other solid solutions. The obtained properties of refractory alloys based on borides and carbides of transition metals and SiC can also be useful in the design of new promising superhard materials.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Іващенко Володимир Іванович

2. Іващенко Володимир Іванович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Зауличний Ярослав Васильович

2. Zaulychnyy Yaroslav Vasyl□ovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Тимошевский Андрій Миколайович

2. Timoshevski A.

Кваліфікація: к.ф.-м.н., 01.04.13

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Закарян Дора Арамаїсівна
2. Zakaryan Dora A

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Картузов Валерій Василійович
2. Kartuzov Valerij Vasylijovych

Кваліфікація: к.ф.-м.н., 01.01.07

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Хижун Олег Юліанович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Хижун Олег Юліанович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	 Юрченко Т.А.