# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0419U000532

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 27-02-2019

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**

## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Водоп'янова Ганна Олександрівна

2. Vodopyanova Ana O.

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** кандидат наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 02.00.04

**Назва наукової спеціальності:** Фізична хімія

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** Не застосовується

**Дата захисту:** 21-02-2019

**Спеціальність за освітою:** Ливарне виробництво чорних та кольорових металів і сплавів

**Місце роботи здобувача:** Донбаська державна машинобудівна академія

**Код за ЄДРПОУ:** 02070789

**Місцезнаходження:** вул. Академічна, буд. 72, м. Краматорськ, Донецька обл., 84313, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## III. Відомості про організацію, де відбувся захист

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** Д 26.207.02

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05416930

**Місцезнаходження:** вул. Кржижановського, 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:** Донбаська державна машинобудівна академія

**Код за ЄДРПОУ:** 02070789

**Місцезнаходження:** вул. Академічна, буд. 72, м. Краматорськ, Донецька обл., 84313, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## V. Відомості про дисертацію

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 31.15, 31.15.25, 31.15.25.09

**Тема дисертації:**

1. Термодинамічні властивості розплавів аморфоутворюючої системи Cu–Ni–Ti–Hf

2. Thermodynamic properties of melts of the Cu–Ni–Ti–Hf glass-forming system

**Реферат/анотація:**

1. Дисертація присвячена вивченню термодинамічних властивостей розплавів аморфоутворюючої чотирикомпонентної системи Cu–Ni–Ti–Hf та моделювання фазових рівноваг з участю переохолодженої рідини. Вперше методом високотемпературної калориметрії при температурі 1873 K були досліджені парціальні ентальпії титану та гафнію. В рамках моделі асоційованого розчину були розраховані термодинамічні функції змішування три- та чотирикомпонентних розплавів системи Cu–Ni–Ti–Hf. За допомогою емпіричного правила були прогнозовані концентраційні області аморфізації методом загартування. В рамках CALPHAD-методу вперше виконано термодинамічний опис системи Cu–Ti–Hf, а також розроблено базу даних параметрів моделей термодинамічних властивостей розчинних фаз системи Cu–Ni–Ti–Hf. Проведено моделювання метастабільних фазових перетворень за участю переохолоджених три- та чотирикомпонентних розплавів системи Cu–Ni–Ti–Hf.

2. The thesis is aimed to study the thermodynamic properties of the melts of the glass-forming four-component Cu–Ni–Ti–Hf system and modeling of phase transformations with their participation. As the main research methods were used: the high-temperature isoperibolic calorimetry for the experimental determination of the mixing enthalpy of liquid alloys, the model of the ideal associate solution for the theoretical study of the temperature-concentration dependence of mixing thermodynamic properties of the melts and the parameters of atomic ordering in them; the CALPHAD-method for modeling of equilibrium and metastable phase transformations with participation of the melts. The partial enthalpies of the mixing of titanium and hafnium have been investigated for the first time at a temperature of 1873 K by calorimetric method along the cross sections with a constant ratio of components in the corresponding concentration intervals: the Cu–Ni–Hf system – xHf = 0–0,45 for sections xCu/xNi = 3 and xCu/xNi = 1/3; xHf = 0–0,40 for section xCu/xNi = 1; Cu–Ti–Hf system – xTi = 0–0,25 for section xCu/xHf = 3/1, xHf = 0–0,5 for section xCu/xTi = 3/1; Ni–Ti–Hf system – xTi = 0–0,64 for section xNi/xHf = 3/1 and xHf = 0–0,57 for section xNi/xTi = 3/1. It was shown that partial enthalpies of mixing titanium and hafnium in the studied concentration ranges are predominantly negative. The integral enthalpy of mixing of ternary melts also show mainly negative values, which indicate an intensive chemical interaction between the components of the melts. The obtained experimental data on the mixing enthalpies became the basis for finding the parameters of the associated solution model. Thermodynamic functions of mixing and parameters of chemical short-range order of three- and four-component melts of the Cu–Ni–Ti–Hf system were calculated in the framework of the model in the wide temperature interval for the first time. The composition ranges of amrphisation of liquid alloys by melt quenching were predicted using the empirical rule: 0,25 < xTi < 0,81 for the Cu–Ni–Ti system, 0,20 < xHf < 0,80 for the Cu–Hf–Ni system, 0,17 < xCu < 0,73 for the Cu–Ti–Hf system, 0,24 < xNi < 0,85for the Ni–Ti–Hf system, xCu = 0–0,642 for the section Ni0,33Ti0,33Hf0,33–Cu, xNi = 0–0,762 for the section Cu0,33Ti0,33Hf0,33–Ni, xTi = 0–0,687 for the section Cu0,33Ni0,33Hf0,33–Ti, xHf = 0–0,719 for the section Cu0,33Ni0,33Ti0,33–Hf. In the framework of the CALPHAD-method, the thermodynamic assessment of the Cu–Ti–Hf system was developed for the first time. The isothermal and polythermal sections, projections of liquidus and solidus surfaces of the phase diagram of the system and its reaction scheme were constructed as a result of the calculations. In the framework of the CALPHAD-method the database of model parameters of thermodynamic properties of solution phases of the Cu–Ni–Ti–Hf system was developed for the first time. In the framework of the CALPHAD-method the modeling of metastable phase transformations with the participation of supercooled three- and four-component melts of the Cu–Ni–Ti–Hf system was carried out. The concentration regions of the formation of multicomponent amorphous and bulk amorphous alloys were correctly interpreted for the previously investigated systems and also were predicted for unexplored systems on the base of such calculations. The obtained in the work scientific results can be useful for a wide range of scientists in the fields of physical chemistry, chemical and physical materials science, synthesis of alloys, the theory of metallurgical and foundry processes. The predicted concentration regions of amorphisation form a basis for the directed search for new amorphous alloys.

**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. Турчанін Михайло Анатолійович

2. Turchanin Mykhailo A.

**Кваліфікація:** д. х. н., 02.00.04

**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. Бондар Анатолій Адольфович

2. Bondar Anatolii A.

**Кваліфікація:** д. х. н., 02.00.04

**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. Усенко Наталія Ігорівна

2. Usenko Natalia I.

**Кваліфікація:** к. х. н., 02.00.04

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Рецензенти**

## VIII. Заключні відомості

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