# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0518U000754

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 03-10-2018

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**

## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Корній Сергій Андрійович
2. Korniy Sergiy Andrijovych

**Кваліфікація:** к. т. н., 05.17.14

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** доктор наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 05.17.14

**Назва наукової спеціальності:** Хімічний опір матеріалів та захист від корозії

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

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

**Дата захисту:** 26-09-2018

**Спеціальність за освітою:** Фізика

**Місце роботи здобувача:** Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 03534506

**Місцезнаходження:** вул. Наукова, 5, м. Львів, Львівська обл., 79060, 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):** Д 35.226.02

**Повне найменування юридичної особи:** Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 03534506

**Місцезнаходження:** вул. Наукова, 5, м. Львів, Львівська обл., 79060, 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:** Фізико-механічний інститут ім. Г. В. Карпенка НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 03534506

**Місцезнаходження:** вул. Наукова, 5, м. Львів, Львівська обл., 79060, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## V. Відомості про дисертацію

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 81.33

**Тема дисертації:**

1. Прогнозування механізмів взаємодії металевих систем з корозивним середовищем методами квантової хімії

2. Prediction of interaction mechanisms of metallic systems with corrosive environment by quantum chemistry methods

**Реферат/анотація:**

1. У дисертації запропоновано нове вирішення науково-прикладної проблеми теоретичного оцінювання та прогнозування механізмів взаємодії металевих систем з корозивним середовищем із використанням квантово-хімічних методів розрахунку енергетичних характеристик поверхневих процесів та кластерних моделей. За удосконаленою методикою оцінювання корозії багатокомпонентних металевих систем методом функціоналу густини розраховано енергію взаємодії складників корозивного середовища з поверхнею та активаційні бар'єри виходу-іонізації атомів металів, що дало можливість на прикладі інтерметалідів алюмінію оцінити механізм їх корозії у різних середовищах, а також спрогнозувати корозійно-морфологічну стабільність бінарних наночастинок платини PtMe (Me – Cr, Fe, Co, Ni, Ru) у середовищі низькотемпературних паливних комірок. Встановлені фізико-хімічні закономірності взаємодії інтерметалідів Al2Cu та Al2CuMg з корозивним середовищем дали змогу запропонувати альтернативний механізм їх

руйнування та пояснити експериментальні результати. Теоретично обґрунтовано інгібувальну здатність поверхнево-активного рамноліпідного біокомплексу на алюмінієвому сплаві та спрогнозовано механізм синергічної взаємодії рамноліпіду із фосфатами кальцію та цинку, що сприяє їх солюбілізації. Розвинуто та поглиблено теоретичні уявлення про механізм впливу складників корозивного середовища на поверхні контактуючих металічних кластерів, які узгоджуються із положеннями теорії структурно-термічної активації поверхні під час трибокорозії. Розроблені моделі корозії та отримані квантово-хімічні закономірності взаємодії середовища з багатокомпонентними системами дали змогу встановити взаємозв'язок між розрахованими атомно-молекулярними характеристиками впливу складників корозивного середовища на матеріали та їх корозійними властивостями, які визначені експериментально.

2. The dissertation provides novel insights into the theoretical evaluation and prediction of corrosion resistance of multicomponent metallic systems along with the establishment of their local corrosion damage mechanisms based on the development of atomic-molecular models of processes in the metal-environment space. This work also contributes to the improvement of quantum-chemical calculations for the multicomponent systems using the density functional method in a cluster approximation. Based on the quantum-chemical density functional method, we have calculated the interaction of components of a corrosive environment with a surface and also the activation barriers of metal atoms ionization taking into account the influence of the aqueous medium and the charge state of corrosion ions and the surface. This approach has allowed us to evaluate the ways of metal corrosion in alkaline and acidic environments using an aluminum alloy intermetallide as an example substance. In addition, we could predict the corrosion-morphological stability of binary platinum nanoparticles with the shell structure of PtMe (Me – Cr, Fe, Co, Ni, Ru) in the low-temperature fuel cell environment. Next, using data-calculation analysis, we have determined the interaction between the intermetallic phases of aluminum alloys Al2Cu and Al2CuMg and corrosive environment, which allowed to propose an alternative mechanism for alloy corrosion and to explain the existing experimental results. Moreover, we have theoretically substantiated the inhibitory effect of modified zeolites and surface-active ramnolipid biocomplexes on aluminum alloys. In addition, we have revealed the possibility of formation of stable rhamnolipid complexes with aluminum ions that can precipitate on the metal surface forming an organic barrier layer, thereby preventing metal corrosion. We have also predicted the mechanism of synergistic interaction of rhamnolipids with calcium and zinc phosphates, which contributes to lipid solubilization. The established relationships between chemical composition, crystall structure, the nature of chemical bonding in binary platinum nanoclusters and their reactivity enable us to provide practical recommendations for the prediction of properties and creation of new efficient binary platinum-based nanomaterials for low-temperature fuel cells.

**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. Похмурський Василь Іванович

2. Pokhmurskii Vasyl Ivanovich

**Кваліфікація:** д. т. н., 05.17.14

**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. Похмурський Василь Іванович

2. Pokhmurskii Vasyl Ivanovich

**Кваліфікація:** д. т. н., 05.17.14

**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. Знак Зеновій Орестович

2. Znak Zenoviy Orestovych

**Кваліфікація:** д. т. н., 05.17.01

**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. Берсірова Оксана Леонідівна

2. Bersirova Oksana Leonidivna

**Кваліфікація:** д. т. н., 05.17.03

**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. Курмакова Ірина Миколаївна

2. Kurmakova Iryna Mykolajivna

**Кваліфікація:** д. т. н., 05.17.14

**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. Чигиринець Олена Едуардівна

2. Chygyrynets Olena Eduardivna

**Кваліфікація:** д. т. н., 05.17.14

**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** Панасюк Володимир Васильович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні** Панасюк Володимир Васильович

**Відповідальний за підготовку облікових документів**

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності** Юрченко Т.А.