Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0521U100873

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-04-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Штаблавий Ігор Іванович

2. Shtablavyi Ihor Ivanovych

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.13

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 01.04.13

Назва наукової спеціальності: Фізика металів

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 14-04-2021

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, 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 35.051.09

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 53.03.05, 53.03.07

Тема дисертації:

1. Кореляції вільного об'єму та структури ближнього порядку в металевих розплавах з різним ступенем мікронеоднорідності атомного розподілу

2. Correlations of free volume and short-range order structure in metallic melts with different degrees of microheterogeneity of atomic distribution

Реферат/анотація:

1. Робота присвячена вирішенню фундаментальних та практичних проблем, пов'язаних із встановленням взаємозв'язку між структурою ближнього порядку та вільним об'ємом у металевих розплавах. Робота містить результати рентгеноструктурного дослідження, комп'ютерного моделювання і розрахунку вільного об'єму металевих розплавів, а також дво- та трикомпонентних сплавів і композитів на їхній основі. Крім того, досліджено структуру та вільний об'єм рідкофазних композитів з металевою матрицею. Для вивчення атомної структури розплавів застосовували аналіз температурних та концентраційних залежностей загальних та парціальних структурних параметрів (міжатомних віддалей та координаційних чисел). Вільний об'єм сплавів в рідкому стані в межах ближнього порядку обчислювали з використанням значень радіусів перших координаційних сфер та кількості атомів, які містяться в них. На основі комп'ютерних моделей розплавів було обчислено незайнятий атомами об'єм в рамках теорії вільного об'єму та діркової моделі

розплавів. Показано, що вільний об'єм в межах першої координаційної сфери має менші значення порівняно з вільним об'ємом, обчисленим на більшій відстані, а також середнім вільним об'ємом у межах сплаву. Встановлено, що для вільного об'єму, обчисленого в межах першої координаційної сфери, характерні немонотонні зміни залежно від вмісту компонент сплаву, тоді як його залежність від температури є близькою до лінійної. У випадку систем, для яких характерне формування хімічних сполук в кристалічному стані виявлено, що основний вплив на величину вільного об'єму після плавлення має взаємодія атомів різного сорту, в результаті чого відбувається формування кластерів з хімічним впорядкуванням. Для системи Co-Sn встановлено немонотонну залежність структурних параметрів та вільного об'єму в межах першої координаційної сфери від вмісту компонент. Точки перегину температурних залежностей вільного об'єму в межах ближнього порядку відповідають концентраціям сплавів, кластери яких формують структуру розплавів системи Co-Sn. Встановлено, що додавання нікелю до розплаву Al-Si зумовлює зменшення вільного об'єму за рахунок розміщення атомів нікелю в порожнинах базового розплаву. Причиною цього є переважаюча взаємодія між атомами нікелю та одночасно алюмінію та кремнію. У цьому випадку можемо говорити про так званий «зшиваючий» вплив нікелю на структуру розплавів системи Al-Si. Показано, що у випадку композитів з рідкою матрицею вільний об'єм визначається головно збільшенням ступеня атомного впорядкування розплаву на межі з кристалічними частинками.

2. The work is devoted to solving fundamental and practical problems related to the establishment of the relationship between the structure of the short-range order and the free volume in metal melts. The work contains the results of X-ray diffraction research, computer modeling and free volume calculation of metal melts as well as two- and three-component alloys and composites based on them. In addition, the structure and free volume of liquid-phase composites with a metal matrix were studied. In order to study the atomic structure of melts, we used the analysis of temperature and concentration dependences of full and partial structural parameters (interatomic distances and coordination numbers). The free volume of the alloys in the liquid state within the short order was calculated using the values of the radii of the first coordination spheres and the number of atoms contained in them. On the basis of computer models of melts, the volume not occupied by atoms was calculated within the framework of the theory of free volume and the hole model of melts. It is shown that the free volume within the first coordination sphere has smaller values compared to the free volume calculated at a greater distance, as well as the average free volume within the alloy. As a result of the study of liquid metals, which are characterized by dense packing of atoms in the crystalline state and in a small range of temperatures after melting, it was found that the change in main structure parameters is mainly due to an increase in the size of the intercluster region, the degree of ordering of which is smaller compared to clusters, and the change in free volume within the first two coordination spheres is determined mainly by changing the boundaries of the first and second coordination spheres without changing the coordination number. For the eutectic systems Sn-Bi and Sn-Pb, it was shown that the dynamics of the change in free volume with the temperature of the melts as well as the temperature dependences of the structural parameters, indicates the transition from cluster to atomic solution. In the case of eutectic systems with a predominant content of one of the components, the microhomogeneity of the atomic structure is due to the formation of clusters that form around atoms whose concentration in the eutectic is lower. Analysis of the results obtained by both experimental methods and methods of structure reconstruction makes it possible to explain the mechanism of structure formation and free volume transformation of melts with a tendency to segregation of components. Results of the free volume calculation for Bi100-xZnx alloys indicate a significant difference between the free volume calculated within the first coordination sphere and the average free volume per atom. This difference in the values of free volume indicates a significant degree of heterogeneity of the studied melts, which is due to their cluster structure, which leads to the formation of two types of atomic ordering. Using the method of reconstruction of the structure of the Ga0,7Bi0,3 melt for different temperatures, the destruction of large cavities during the transition of the liquid from the microheterogeneous to the homogeneous state was established. In the case of systems which are characterized by the formation of chemical compounds in the crystalline state it was found that the main influence on the value of free volume after melting is the interaction of atoms of different types resulting in the formation of clusters with chemical ordering. For the

Co-Sn system, a nonmonotonic dependence of structural parameters and free volume within the first coordination sphere on the content of components is established. The inflection points of the temperature dependences of the free volume in the frame of short-range order correspond to the concentrations of alloys whose clusters form the structure of the melts of the Co-Sn system. It has been found that the addition of nickel to the Al-Si melt reduces the free volume by placing nickel atoms in the cavities of the base melt. The reason for this is the predominant interaction between nickel atoms and simultaneously aluminum and silicon. In this case, we can talk about the so-called crosslinking effect of nickel on the structure of the melts of the Al-Si system. Studies of the structure of composites with a liquid metal matrix made it possible to conclude that the degree of ordering of atoms increases due to the effect of surface compaction of the liquid structure observed on the free surface of the liquid or at the liquid-crystal interface. The compaction of the composite structure, we have found, is accompanied by a decrease in free volume within the short-range order. Despite the fact that the introduction of nano- and microparticles promote the increasing of the degree of microinhomogeneity at the mesoscale, at the atomic level there is a decrease in free volume with increasing content of crystalline particles.

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. Мудрий Степан Іванович
2. Mudry Stepan I.

Кваліфікація: д.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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мудрий Степан Іванович

2. Mudry Stepan I.

Кваліфікація: д.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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Семенько Михайло Петрович

2. Semenko Mykhaylo P.

Кваліфікація: д. 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шпотюк Олег Йосипович

2. Shpotyuk Oleh I.

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. Калюжний Юрій Володимирович

2. Kalyuzhnyi Yurii V.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02, 01.04.24

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	Волошиновський Анатолій Степанович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Волошиновський Анатолій Степанович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.