

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U002687

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-07-2024

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Скороход Роман Володимирович

2. Roman V. Skorokhod

Кваліфікація: 104

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-5951-1070

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: 56300 Фізика (104 Фізика та астрономія)

Дата захисту: 16-09-2024

Спеціальність за освітою: Прикладна фізика та наноматеріали

Місце роботи здобувача: Інститут прикладної фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05399225

Місцезнаходження: вул. Петропавлівська, буд. 58, Суми, Сумський р-н., 40000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ2_6684

Повне найменування юридичної особи: Інститут прикладної фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05399225

Місцезнаходження: вул. Петропавлівська, буд. 58, Суми, Сумський р-н., 40000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут прикладної фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05399225

Місцезнаходження: вул. Петропавлівська, буд. 58, Суми, Сумський р-н., 40000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.19.03, 58.33.09

Тема дисертації:

1. Радіаційно-індукована сегрегація в концентрованих металевих сплавах Fe-Cr та Fe-Cr-Ni
2. Radiation-induced segregation in concentrated Fe-Cr and Fe-Cr-Ni metal alloys

Реферат:

1. Дисертацію присвячено послідовному моделюванню радіаційно-індукованої сегрегації в концентрованих сплавах Fe-Cr та Fe-Cr-Ni на основі системи нелінійних диференціальних рівнянь в частинних похідних, числовим розрахунком і порівняльному аналізу визначальних кількісних характеристик радіаційно-індукованої сегрегації за різних умов опромінення та теоретичному дослідженню пізньої стадії рівноважної сегрегації домішки на міжзеренній межі по механізму визрівання Оствальда. Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, переліку використаних джерел та додатку. Обсяг дисертації складає 161 сторінку машинописного тексту, обсяг основної частини становить 115 сторінок та містить 75 рисунків. Список використаних джерел складається із 199 найменувань. Результати дисертаційної роботи опубліковані у 3 наукових працях, що індексується наукометричними базами Scopus та/або Web of Science. Об'єктом дослідження є явище радіаційно-індукованої сегрегації в концентрованих металевих

сплавах та явище рівноважної сегрегації домішки на міжзеренній межі. Метою дисертаційної роботи є послідовне чисельне дослідження явища радіаційно-індукованої сегрегації в концентрованих металевих сплавах Fe-Cr і Fe-Cr-Ni за різних умов опромінення та теоретичний аналіз пізньої стадії рівноважної сегрегації домішки на міжзеренній межі по механізму визрівання Оствальда. При виконанні дисертаційної роботи використовувалися методи математичної фізики та числового моделювання. Зокрема, при перетворенні системи рівнянь радіаційно-індукованої сегрегації для її подальшого числового аналізу використовувалися процедури обезрозмірювання, масштабування та метод скінчених різниць. При дослідженні визрівання Оствальда сферичних виділень нової фази використано асимптотичний аналіз Ліфшиця-Сльозова. В роботі розраховано визначальні кількісні характеристики радіаційно-індукованої сегрегації для сплавів Fe-9Cr та Fe-20Cr-8Ni за різних значень швидкостей продукування точкових дефектів, набраних доз опромінення і температур та проведено аналіз залежностей визначальних кількісних характеристик від названих умов опромінення. Продемонстровано, що в при різних швидкостях продукування точкових дефектів, набраних дозах опромінення та температурах дислокаційна підсистема подавляє ефекти радіаційно-індукованої сегрегації. Продемонстровано як впливає вибір граничних умов на поверхні зразка на результати моделювання радіаційно-індукованої сегрегації. Вперше методами комп'ютерного моделювання показано, що вплив збільшення швидкості продукування точкових дефектів на ефекти радіаційно-індукованої сегрегації можна з достатньо високою точністю компенсувати відносно невеликим підвищенням температури. Вперше теоретично розглянуто кінетику сферичних виділень нової фази на міжзеренній межі, ріст яких лімітується поверхневою кінетикою, з урахуванням дифузійних потоків атомів домішки з глибини зерна до міжзеренної межі на стадії визрівання Оствальда. Отримані в дисертації результати можуть бути використані при моделюванні й прогнозуванні змін локального складу концентрованих сплавів Fe-Cr та Fe-Cr-Ni за умов опромінення, а також слугувати основою для дослідження радіаційно-індукованої сегрегації в сплавах з більшим числом компонент. Крім того одержані результати можуть бути використані при дослідженні кінетики росту сферичних виділень нової фази, які розташовані на міжзеренній межі. Результати дисертаційної роботи можуть бути використані в ІПФ НАН України, ННЦ ХФТІ НАН України, ІЯД НАН України, ІЕРТ НАН України, НАЕК «Енергоатом» та в інших наукових центрах.

2. The thesis is devoted to the sequential modeling of radiation-induced segregation in concentrated Fe-Cr and Fe-Cr-Ni alloys based on a system of nonlinear partial differential equations, numerical calculations and comparative analysis of the governing quantitative characteristics of radiation-induced segregation under different irradiation conditions and theoretical research of late stages of equilibrium segregation of impurities at the grain boundary by the Ostwald ripening mechanism. The thesis consists of an introduction, four chapters, conclusions, a list of used sources and an appendix. The volume of the thesis is 161 pages of typewritten text, the volume of the main part is 115 pages and it contains 75 figures. The list of used sources consists of 199 items. The results of the dissertation work were published in 3 scientific works, which are indexed by the scientometric databases Scopus and/or Web of Science, The object of research is the phenomenon of radiation-induced segregation in concentrated metal alloys and the phenomenon of equilibrium segregation of impurity at the grain boundary. The aim of the thesis is a consistent numerical study of the phenomenon of radiation-induced segregation in concentrated Fe-Cr and Fe-Cr-Ni metal alloys under different irradiation conditions and a theoretical analysis of the late stage of equilibrium segregation of impurities at the grain boundary according to the Ostwald ripening mechanism. The methods of mathematical physics and numerical modeling were used in the dissertation work. In particular, when transforming the system of equations of radiation-induced segregation for its further numerical analysis, the procedures of dimensionless, scaling, and the finite difference method were used. The Lifshits-Slyozov asymptotic analysis was used to study the Ostwald ripening of spherical precipitates of the new phase. In the work, the governing quantitative characteristics of radiation-induced segregation for Fe-9Cr and Fe-20Cr-8Ni alloys were calculated for different values of the production rates of point defects, radiation doses and temperatures, and an analysis of the dependence of the governing quantitative characteristics on the mentioned irradiation conditions was carried out. It was demonstrated that the dislocation subsystem suppresses the effects of radiation-induced segregation at different production rates of point defects, radiation doses, and

temperatures. It is demonstrated how the choice of boundary conditions on the surface of the sample affects the results of simulation of radiation-induced segregation. For the first time, computer simulation methods showed that the effect of increasing the production rate of point defects on the effects of radiation-induced segregation can be compensated with a sufficiently high accuracy by a relatively small increase in temperature. For the first time, the kinetics of spherical precipitates of a new phase at the grain boundary, the growth of which is limited by surface kinetics, was considered theoretically for the first time, taking into account the diffusion flows of impurity atoms from the depth of the grain to the grain boundary at the stage of Ostwald ripening. The results obtained in the thesis can be used in modeling and forecasting changes in the local composition of concentrated Fe-Cr and Fe-Cr-Ni alloys under irradiation conditions, as well as serve as a basis for the study of radiation-induced segregation in alloys with a larger number of components. In addition, the obtained results can be used in the study of the growth kinetics of spherical precipitates of the new phase, which are located at the grain boundary. The results of the dissertation work can be used in the IAP of the National Academy of Sciences of Ukraine, the NSC KIPT of the National Academy of Sciences of Ukraine, the INR of the National Academy of Sciences of Ukraine, the IERT of the National Academy of Sciences of Ukraine, NNEGC "Energoatom" and other scientific centers.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Не застосовується

Підсумки дослідження: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- Skorokhod, R.V., Buhay, O.M., Bilyk, V.M., Denysenko, V.L., Koropov, O.V., Modeling radiation-induced segregation in binary alloys. *East European Journal of Physics*, 2018, 5(1), pp. 61-69.
- Koropov, O., Skorokhod, R., Surface-kinetics-limited ostwald ripening of spherical precipitates at grain boundaries. *East European Journal of Physics*, 2019, (1), pp. 75-85.
- Skorokhod, R.V., Koropov, O.V., Modelling of Radiation-Induced Segregation in Fe-9 at.% Cr Alloy with Alloy Dislocation Subsystem Considered. *Metallofizika i Noveishie Tekhnologii*, 2022, 44(6), pp. 691-711.
- Р.В. Скороход, «Моделювання радіаційно-індукованої сегрегації в тонких плівках Fe-Cr», у IV Всеукраїнській науково-практичній конференції молодих учених «Сучасні проблеми експериментальної, теоретичної фізики та методики навчання фізики», Суми, 24-25 квітня 2018 р. Суми, 2018, с. 53-54.
- Р.В. Скороход, В.Л. Денисенко та О.В. Коропов, «Моделювання радіаційно-індукованої сегрегації в тонких плівках Fe-Cr-Ni», у XIV Міжнародній науково-технічній конференції молодих вчених та фахівців «Проблеми сучасної ядерної енергетики», Харків, 14-16 листопада 2018 р. Харків, 2018 с. 46-47.
- Р.В. Скороход, О.В. Коропов, В.Л. Денисенко та В.Ю. Сторіжко, «Моделювання радіаційно-індукованої сегрегації в сплавах Fe-Cr-Ni під дією іонного опромінення», у XVII Конференції з фізики високих енергій та ядерної фізики, Харків, 26-29 березня 2019 р. Харків, 2019, с.78.
- Р.В. Скороход, «Моделювання радіаційно-індукованої сегрегації в потрійних концентрованих металевих сплавах», у V Всеукраїнській науково-практичній конференції молодих учених «Сучасні проблеми експериментальної, теоретичної фізики та методики навчання фізики», Суми, 22-24 квітня 2019 р. Суми, 2019, с. 70-71.
- Р.В. Скороход та О.В. Коропов, «Математична модель радіаційно-індукованої сегрегації в концентрованих металевих сплавах Fe-Cr-Ni», у VIII Міжнародній науково-практичній конференції «Математика в сучасному технічному університеті», Київ, 27-28 грудня 2019 р. Вінниця: Видавець ФОП

Кушнір Ю. В., 2020, с. 153-160.

- Р.В. Скороход та О.В. Коропов, «Розрахунки визначальних кількісних характеристик радіаційно-індукованої сегрегації в концентрованих металевих сплавах Fe-Cr-Ni», у VI Всеукраїнській науково-практичній конференції молодих учених «Сучасні проблеми експериментальної, теоретичної фізики та методики навчання фізики», Суми, 13-15 квітня 2020 р. Суми, 2020, с. 45-48.
- О.В. Коропов та Р.В. Скороход, «Диференціальні рівняння радіаційно-індукованої сегрегації в N-компонентних концентрованих металевих стопах», у IX Міжнародній науково-практичній конференції «Математика в сучасному технічному університеті», Київ, 28-29 грудня 2020 р. Вінниця: Видавець ФОП Кушнір Ю. В., 2021, с. 80-89.
- Р.В. Скороход та О.В. Коропов, «Моделювання впливу дислокаційної підсистеми на ефекти радіаційно-індукованої сегрегації в трикомпонентному сплаві Fe-20%Cr-8%Ni», у VII Всеукраїнській науково-практичній конференції з міжнародною участю «Сучасні проблеми експериментальної, теоретичної фізики та методики навчання фізики», Суми, 12-14 квітня 2021 р. Суми, 2021, с. 76-77.
- R. Skorokhod and O. Koropov, "The governing quantitative characteristics of radiation-induced segregation in Fe-Cr-Ni alloy", in XII Conference of Young Scientists "Problems of Theoretical Physics", Kyiv, December 21 – 22, 2021. Kyiv, 2021, p. 9-10.
- Р.В. Скороход та О.В. Коропов, «Вплив енергій міграцій вакансій компонентів сплаву на ефекти радіаційно-індукованої сегрегації в аустенітних сплавах Fe-Cr-Ni», у VIII Всеукраїнській науково-практичній конференції з міжнародною участю «Сучасні проблеми експериментальної, теоретичної фізики та методики навчання фізики», Суми, 24-26 жовтня 2022 р. Суми, 2022, с. 71-73.
- Р.В. Скороход та О.В. Коропов, «Дослідження впливу швидкості продукування точкових дефектів та температури на радіаційно-індуковану сегрегацію в сплавах Fe-Cr-Ni методом комп'ютерного моделювання», у IX Всеукраїнській науково-практичній конференції з міжнародною участю «Сучасні проблеми експериментальної, теоретичної фізики та методики навчання фізики», Суми, 10-12 квітня 2023 р. Суми, 2023, с. 78-80.
- Р.В. Скороход та О.В. Коропов, «Розрахунки визначальних кількісних характеристик радіаційно-індукованої сегрегації в сплавах Fe-20Cr-8Ni за різних умов опромінення» у XXIII Всеукраїнській школі-семінарі молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 26-27 жовтня 2023 р. Львів, 2023, с. 28.
- R. Skorokhod and O. Koropov, "The Mutual Influence of Production Rate of Point Defects and Temperature on the Effects of Radiation-Induced Segregation in the Fe-20Cr-8Ni Alloy" in XIV Conference of Young Scientists "Problems of Theoretical Physics", Kyiv, January 16 – 17, 2024. Kyiv, 2024, p. 12.
- О.В. Коропов та Р.В. Скороход, «Пізня стадія сегрегації домішки на міжзеренній межі у випадку утворення сферичних виділень нової фази, ріст яких лімітується поверхневою кінетикою», у X Всеукраїнській науково-практичній конференції з міжнародною участю «Сучасні проблеми експериментальної, теоретичної фізики та методики навчання фізики», Суми, 15-17 квітня 2024 р. Суми, 2024, с. 85-86.

Наукова (науково-технічна) продукція: методи, теорії, гіпотези

Соціально-економічна спрямованість: створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Охоронні документи на ОПВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0118U002291, 0116U002993, 0119U102415, 0122U002427

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Коропов Олександр Володимирович
2. Oleksandr V. Koropov

Кваліфікація: к.ф.-м.н., доц., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-9318-1960

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут прикладної фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05399225

Місцезнаходження: вул. Петропавлівська, буд. 58, Суми, Сумський р-н., 40000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Марченко Іван Григорович
2. Ivan G. Marchenko

Кваліфікація: д. ф.-м. н., с.н.с., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-1341-4950

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут" Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 14312223

Місцезнаходження: вул. Академічна, буд. 1, Харків, Харківський р-н., 61108, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гохман Олександр Рафаїлович
2. Oleksandr R. Hoxhman

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.13

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-0533-2114

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Державний заклад "Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського"

Код за ЄДРПОУ: 02125473

Місцезнаходження: вул. Старопортофранківська, буд. 26, Одеса, 65020, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Батурін Володимир Андрійович

2. Volodymyr A. Baturin

Кваліфікація: к.ф.-м.н., с.н.с., 01.04.20

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-6171-8575

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут прикладної фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05399225

Місцезнаходження: вул. Петропавлівська, буд. 58, Суми, Сумський р-н., 40000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лисенко Олег Борисович

2. Oleg B. Lysenko

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.04

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-0459-4964

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут прикладної фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05399225

Місцезнаходження: вул. Петропавлівська, буд. 58, Суми, Сумський р-н., 40000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради**

Харченко Дмитро Олегович

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

Харченко Дмитро Олегович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Ворошило Олексій Іванович

Реєстратор

УкрІНТЕІ

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**



Юрченко Тетяна Анатоліївна