Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0521U101083

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-05-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Агравал Павло Гянович

2. Ahraval Pavel G

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор 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: 29-04-2021

Спеціальність за освітою: Підйомно-транспортні, будівельні, дорожні машини і обладнання

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 Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Кржижановського, буд. 3, м. Київ, 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

Тема дисертації:

1. Термодинаміка і фазові перетворення в багатокомпонентних аморфоутворюючих системах перехідних металів

2. Thermodynamics and phase transformations in multicomponent glass-forming systems of transition metals

Реферат/анотація:

1. АНОТАЦІЯ Агравал П.Г. Термодинаміка і фазові перетворення в багатокомпонентних аморфоутворюючих системах перехідних металів. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора хімічних наук за спеціальністю 02.00.04 – фізична хімія. – Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, Київ, 2021. Методом високотемпературної калориметрії досліджено ентальпії змішування компонентів у розплавах систем Fe–(Ti, Zr, Hf) і Co–Cu–(Ti, Zr), Cu–Fe–(Ti, Zr, Hf), Cu–Ni– 42 (Ti, Hf), Cu–Ti–(Zr, Hf), Ni–Ti–(Zr, Hf). Між компонентами розплавів відбувається інтенсивна хімічна взаємодія, яка виражається в переважно від'ємних значеннях ентальпій змішування. При цьому визначну роль відіграють подвійні взаємодії, в яких роль акцептора електронів припадає на Fe, Co, Ni, Cu, а роль донора електронів – на Ti, Zr, Hf. В рамках моделі асоційованого розчину (МАР) описані термодинамічні функції змішування розплавів досліджених систем і показано, що властиві їм від'ємні відхилення від

ідеальності збільшуються зі зниженням температури. Термодинамічна база даних для розплавів системи Co–Cu–Fe–Ni–Ti–Zr–Hf була використана для моделювання термодинамічних функцій змішування розплавів три-, чотири- і п'ятикомпонентної систем, і визначена залежність внесків в енергію Гіббса змішування від складу, температури і числа компонентів розплавів. В рамках MAP розраховано склад асоційованого розчину, оцінено ступінь ближнього хімічного порядку в розплавах досліджених систем і показано його зростання зі зниженням температури. В рамках CALPHAD-методу розроблені термодинамічні описи систем Ti–Zr, Cu–Ti–Zr та Cu–Ti–Hf. Створено базу параметрів моделей термодинамічних властивостей розплавів і граничних твердих розчинів на основі чистих компонентів системи Co–Cu–Fe–Ni–Ti–Zr–Hf, з використанням якої розраховані метастабільні фазові діаграми за участю переохолоджених розплавів дво-, три-, чотири- і п'ятикомпонентних систем. На підставі проведених розрахунків інтерпретовані відомі з експерименту концентраційні області утворення аморфних сплавів та прогнозовані концентраційні області аморфізації для недосліджених багатокомпонентних систем. Ключові слова: високотемпературна калориметрія, ентальпії змішування, сплави на основі заліза, кобальту, нікелю, міді, титану, цирконію і гафнію, термодинамічні властивості рідких сплавів, модель асоційованого розчину, CALPHAD-метод, стабільні та метастабільні фазові діаграми, концентраційні області аморфізації розплавів.

2. SUMMARY Agraval P.G. Thermodynamics and phase transformations in multicomponent glass-forming systems of transition metals. – Qualification scientific thesis as the manuscript. The thesis for the degree of Doctor of chemical sciences by specialty 02.00.04 – physical chemistry. – I. M. Frantsevich Institute for Problems of Materials Sciences, NAS of Ukraine, Kiev, 2021. The thesis is devoted to the investigation of thermodynamic properties of multicomponent melts of glass-forming systems of transition metals. Their dependence on the composition determination, temperature and number of system components was determined and factors that determine their ability to form an amorphous phase in nonequilibrium synthesis were identified. The research was also pointed to modeling of equilibrium and metastable phase diagrams with participation of supercooled melts and predicting of their concentration regions of amorphization. The enthalpies of mixing of the components in the binary Fe–Ti, Fe–Zr, Fe–Hf and in the ternary Co–Cu–Ti, Co–Cu–Zr, Cu–Fe–Ti, Cu–Fe–Zr, Cu–Fe–Hf, Cu–Ni–Ti, Cu–Ni–Hf, Cu–Ti–Zr, Cu–Ti–Hf, Ni–Ti–Zr i Ni–Ti–Hf systems were determined by high temperature calorimetry. The isotherms of integral enthalpy of mixing in the investigated systems were described using Redlich–Kister–Muggianu equation. It is shown that there is an intense chemical interaction between the components of the melts, which is expressed in the mostly negative values of the mixing enthalpies. Analysis of the topology of isotherms of the integral enthalpy of mixing of three-component melts at 1873 K indicates that pair interactions play a significant role in the considered systems. The role of electron acceptor in the interaction belongs to the Fe, Co, Ni, Cu, and the role of electron donor belongs to the Ti, Zr, Hf. Within the framework of the associated solution model (ASM), the thermodynamic mixing functions of melts of the investigated systems were described over the entire composition range and in a wide temperature range, and it was shown that the inherent for them mostly negative deviations from ideality increase with decreasing temperature. A thermodynamic database that describes the functions of glass-forming melts of the Co–Cu–Fe–Ni–Ti–Zr–Hf system is created. This database is based on self-consistent parameters ASM and mathematical models for melts of 21 binary and 16 ternary systems. The obtained database has been used for modeling of the temperature and concentration dependences of the thermodynamic mixing functions of liquid alloys of the quaternary Cu–Ni–Ti–Zr, Cu–Ni–Ti–Hf, Cu–Ni–Zr–Hf, Cu–Ti–Zr–Hf, Ni–Ti–Zr–Hf and the quinary Cu–Ni–Ti–Zr–Hf systems and for calculation of thermodynamic functions of mixing of 21 equiatomic quinary liquid alloys of the Co–Cu–Fe–Ni–Ti–Zr–Hf system. The composition of the associated solution was calculated within the framework of ASM and the degree of short-range chemical order was estimated as the total molar fraction of χ_{assoc} associates in the melts of two-, three-, four- and five-component systems. It was shown that the degree of the short-range chemical order in the melts of glass-forming systems is significant and increases with decreasing of temperature. Using the empirical rule, the concentration regions of amorphization for Cu–Ti–Zr, Cu–Ni–Ti, Cu–Ni–Zr Cu–Ni–Hf and Ni–Ti–Zr melts were interpreted, and the concentration regions of amorphization were predicted for Co–Cu–Ti, Co–Cu–Zr, Co–Cu–Hf, Cu–Fe–Ti, Cu–Fe–Zr, Cu–Fe–Hf, Cu–Ti–Hf, Cu–Zr–Hf, Ni–Ti–Hf, Ni–Zr–Hf, Cu–Ni–Ti–Hf, Cu–Ni–Ti–Zr,

Cu–Ni–Zr–Hf, Cu–Ti–Zr–Hf, Ni–Ti–Zr–Hf and Cu–Ni–Ti–Zr–Hf melts. Within the framework of the CALPHAD method, a thermodynamic description of the Cu–Ti–Hf system has been performed for the first time, and new thermodynamic descriptions of the Ti–Zr and Cu–Ti–Zr systems have been developed. Within the framework of the CALPHAD method, a database of parameters of models of thermodynamic properties of melts and boundary solid solutions based on pure components for the multicomponent Co–Cu–Fe–Ni–Ti–Zr–Hf system was developed. The database contains information on the parameters of models of thermodynamic properties of liquid alloys and solid solutions of twenty-one binary systems and sixteen ternary systems. The parameters of the models of excess Gibbs energy presented in the database were used for the calculation of metastable phase transformations with the participation of supercooled liquid alloys and boundary solid solutions of the binary Fe–(Ti, Zr,Hf) systems and of the ternary Co–Cu–(Ti, Zr, Hf), Cu–Fe–(Ti, Zr, Hf), Cu–Ni–(Ti, Zr, Hf), Cu–Ti–(Zr, Hf), Cu–Zr–Hf, Ni–Ti–(Zr, Hf), Ni–Zr–Hf systems. Keywords: high-temperature calorimetry, enthalpies of mixing, alloys based on iron, cobalt, nickel, copper, titanium, zirconium and hafnium, thermodynamic properties of liquid alloys, associated solution model, CALPHAD method, stable and metastable diagrams, concentration regions of amorphization of melts

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 Mikhail 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. Турчанін Михайло Анатолійович

2. Turchanin Mikhail 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. Роїк Олександр Сергійович

2. Roik Oleksandr S

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. Судавцова Валентина Савелієвна

2. Sudavtsova Valentina S

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. Туркевич Володимир Зіновійович

2. Turkevych Volodymyr Z.

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Веліканова Тамара Яківна
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Веліканова Тамара Яківна
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.