

ВІСНОВОК
про наукову новизну, теоретичне та практичне значення
результатів дисертації

«Стабільність та властивості твердих розчинів на основі боридів і карбідів перехідних металів та карбіду кремнію: першопринципні дослідження»

здобувача наукового ступеня доктора філософії

Медюха Назарія Романовича

за спеціальністю 105 – Прикладна фізика та наноматеріали.

Фаховий семінар проведений на засіданні Вченої ради Інституту проблем матеріалознавства Національної академії наук України.

«25» листопада 2020 року, протокол № 11/ІІ.

1. Актуальність теми. Бориди та карбіди перехідних металів привертають велику увагу дослідників через свої унікальні фізичні властивості, а саме високе значення твердості та температури плавлення, значну корозійну стійкість в агресивних середовищах і т. ін. Для деяких систем тверді розчини мають кращі властивості, ніж окремі компоненти, з яких вони утворені. Попри те, що в літературі є певні дані щодо властивостей твердих розчинів на основі карбідів та боридів перехідних металів та SiC, доволі часто вони є неповними. На додаток, механізми стабілізації твердих розчинів є мало дослідженими, а їх розуміння є дуже важливим, оскільки воно дає можливість передбачити експлуатаційні характеристики багатокомпонентних матеріалів. Підсумовуючи сказане, вивчення властивостей твердих розчинів на основі боридів та карбідів перехідних металів та SiC є актуальним.

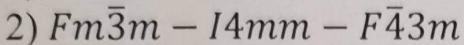
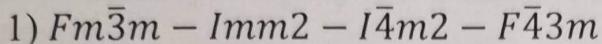
2. Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційні дослідження були проведені в рамках відомчих тем Інституту проблем матеріалознавства НАНУ: III-9-15 «Вплив умов синтезу на наноструктуру та властивості плівок на основі тугоплавких боридів, силіцидів і оксидів» (2015-2017 pp.), III-7-35(Ц) «Розробка зносостійких покриттів на основі системи Al(Mg)-B-Si-C-N для довгострокового використання» (2017-2021 pp.), III-7-18 «Роль границь розділу у зміненні нових надтвердих нанокомпозитних покриттів: експеримент і теорія» (2018-2020 pp.) та згідно з контрактом Українського Науково-Технологічного Центру № 6372 «Першопринципний підхід та розробка нових надтвердих нанокомпозитних покриттів» (2018-2019 pp.).

3. Наукова новизна отриманих результатів. У результаті проведеного дослідження дисертантом отримані такі нові результати:

1. Визначено механізми впливу складу твердих розчинів TiB_2-NbB_2 і TiB_2-ZrB_2 на їхню стабільність та механічні властивості. Встановлено, що змінення твердих розчинів TiB_2-NbB_2 відбувається завдяки посиленню міжатомної взаємодії в z-напрямку. Результатами обчислювального експерименту доведено, що сплави TiB_2-ZrB_2 розпадатимуться згідно з

бінодальним чи спінодальним механізмами нижче критичної температури 1973 К.

2. Поєднання моделювання в рамках першопринципної молекулярної динаміки, теоретико-групового аналізу та вивчення фононних спектрів дозволило констатувати два можливих шляхи фазових перетворень при декомпресії $B1$ - SiC :



Структурні перетворення з утворенням проміжних метастабільних фаз при декомпресії відбуваються завдяки конденсації певних фононних мод та викликаних ними деформацій кристалічної гратки.

3. Показано, що тверді розчини $TiC-SiC$ і $NbC-SiC$ є нестабільними. Для системи $TiC-SiC$ побудовано розрахункову фазову діаграму (бінодаль і спінодаль), враховуючи можливість утворення $B1$ та $B3$ структур залежно від їх складу. Встановлено, що проміжні склади системи $NbC-SiC$ є динамічно і механічно нестабільними.

4. Вперше проведено комплексне дослідження стабільності та механічних властивостей твердих розчинів на основі карбідів перехідних металів IV, V та частково VI груп (Ti , Zr , Hf , V , Nb , Ta , W) показало, що їх стабільність залежить від різниці об'ємів кінцевих карбідів та степені заповненості їх металевих смуг. Встановлено, що тверді розчини, утворені карбідами з однаковою кількістю валентних електронів, є нестабільними (енергія змішування позитивна) або ідеальними (енергія змішування близька до нуля). Запропоновано, що сплави з кількістю валентних електронів 8.5-8.75 матимуть найвищу твердість.

4. Теоретичне та практичне значення результатів дисертації. Результати досліджень даної роботи та методики для їх отримання можуть бути використані для прогнозування фазових переходів, механізмів зміщення, механічних та термодинамічних властивостей інших твердих розчинів, таких, наприклад, як потрійних нітридних систем чи карбонітридів, що призведе до можливості конструктування композитів на основі тугоплавких сполук з прогнозованим рівнем експлуатаційних характеристик.

5. Використання результатів роботи. Вивчені дисертантом властивості тугоплавких сплавів на основі боридів і карбідів перехідних металів та SiC можуть бути корисними при розробці нових надтвердих матеріалів.

6. Особиста участь автора в одержанні наукових та практичних результатів, що викладені в дисертаційній роботі.

Дисертаційна робота виконана у відділі фізичного матеріалознавства тугоплавких сполук ІПМ НАНУ, науковий керівник доктор фізико-математичних наук, завідувач відділу Іващенко Володимир Іванович.

Розглянувши звіт подібності щодо перевірки на плагіат, рецензенти дійшли висновку, що дисертаційна робота Медюха Назарія Романовича є результатом самостійних досліджень здобувача і не містить елементів плагіату та запозичень. Використані ідеї, результати і тексти інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

Дисертація характеризується єдністю змісту та відповідає вимогам щодо її оформлення.

7. Перелік публікацій за темою дисертації із зазначенням особистого внеску здобувача.

За результатами досліджень опубліковано 9 наукових праць, у тому числі 0 монографій, 9 статей у наукових фахових виданнях (з них 6 статей у періодичних наукових виданнях інших держав, які входять до ОЕСР та/або Європейського Союзу, фахових виданнях України категорії «А», або закордонних виданнях, що входять до WoS або Scopus) 0 патентів України, 3 тез доповідей в збірниках матеріалів конференцій:

[1] V.I. Ivashchenko, P.E.A. Turchi, V.I. Shevchenko, N.R. Mediukh, L. Gorb, J. Leszczynski, Phase diagram, electronic, mechanical and thermodynamic properties of TiB₂-ZrB₂ solid solutions: A first-principles study, Mater. Chem. Phys. 263 (2021) 124340. doi:<https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2021.124340>.

[2] V. Ivashchenko, P. Turchi, L. Gorb, J. Leszczynski, N. Mediukh, R. Shevchenko, Temperature-induced phase transitions in the rock-salt type SiC: A first-principles study, J. Phys. Condens. Matter. 31 (2019). doi:[10.1088/1361-648X/ab2dc8](https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab2dc8).

[3] V. Ivashchenko, P. Turchi, L. Gorb, J. Leszczynski, N. Medukh, R. Shevchenko, Stability of SiC and SiN interfaces in titanium carbide and nitride based heterostructures, J. Appl. Phys. 125 (2019) 75303. doi:[10.1063/1.5082848](https://doi.org/10.1063/1.5082848).

[4] V.I. Ivashchenko, P.E.A. Turchi, N.R. Medukh, V.I. Shevchenko, L. Gorb, J. Leszczynski, A first-principles study of the stability and mechanical properties of ternary transition metal carbide alloys, J. Appl. Phys. 125 (2019) 235101. doi:[10.1063/1.5096646](https://doi.org/10.1063/1.5096646).

[5] N.R. Mediukh, P. Turchi, V. Ivashchenko, V.I. Shevchenko, First-principles calculations for the mechanical properties of Ti-Nb-B₂ solid solutions, Comput. Mater. Sci. 129 (2017) 82–88. doi:[10.1016/j.commatsci.2016.11.053](https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2016.11.053).

[6] N.R. Mediukh, V.I. Ivashchenko, P.E.A. Turchi, V.I. Shevchenko, J. Leszczynski, L. Gorb, Phase diagrams and mechanical properties of TiC-SiC solid solutions from first-principles, Calphad. 66 (2019) 101643. doi:<https://doi.org/10.1016/j.calphad.2019.101643>.

[7] N. Mediukh, V. Ivashchenko, V. Shevchenko, First-Principles Study of the Stability of the TiC-ZrC Solid Solutions, in: 2019 IEEE 9th Int. Conf. Nanomater. Appl. Prop., 2019. doi:[10.1109/NAP47236.2019.216925](https://doi.org/10.1109/NAP47236.2019.216925).

[8] N.R. Mediukh, V.I. Ivashchenko, V.I. Shevchenko, First-principles study of the stability of NbC-SiC solid solutions, in: 2017 IEEE 7th Int. Conf. Nanomater. Appl. Prop., 2017. doi:[10.1109/NAP.2017.8190215](https://doi.org/10.1109/NAP.2017.8190215).

[9] N.R. Mediukh, V.I. Ivashchenko, D.A. Pogrebnjak, V.I. Shevchenko, First-principles study of thermodynamic and stability properties of TiC-SiC alloys, in: 2016 Int. Conf. Nanomater. Appl. Prop., 2016. doi:[10.1109/NAP.2016.7757247](https://doi.org/10.1109/NAP.2016.7757247).

ВВАЖАТИ, що дисертаційна робота Медюха Назарія Романовича

«Стабільність та властивості твердих розчинів на основі боридів і карбідів переходних металів та карбіду кремнію: першопринципні

дослідження», яка подана на здобуття ступеня доктора філософії, за своїм науковим рівнем та практичною цінністю, змістом та оформленням повністю відповідає вимогам пп. 9, 10, 11 «Порядку проведення експерименту з присудження ступеня доктора філософії», затвердженному постановою Кабінету Міністрів України від 6 березня 2019 р. № 167, та відповідає напрямку наукового дослідження освітньо-наукової програми ІПМ НАНУ зі спеціальності 105 – прикладна фізика та наноматеріали.

РЕКОМЕНДУВАТИ дисертаційну роботу «Стабільність та властивості твердих розчинів на основі боридів і карбідів перехідних металів та карбіду кремнію: першопринципні дослідження», подану Медюхом Назарієм Романовичем на здобуття ступеня доктора філософії, до захисту.

Рецензенти:

д.ф.-м.н.
провідний н.с. ІПМ НАНУ

к.ф.-м.н.
завідувач відділом ІПМ НАНУ

Закарян
Дора Арамаїсівна

Картузов
Валерій Васильович