Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0411U007030

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-12-2011

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Крикля Олександр Олександрович
2. Kryklia Olexandr Olexandrovich

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.07

Назва наукової спеціальності: Фізика твердого тіла

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 09-11-2011

Спеціальність за освітою: 8.07.0203

Місце роботи здобувача: Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: 03680, м. Київ -142, вул. Кржижановського, 3

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 26.207.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Кржижановського, 3, м. Київ, Київська обл., 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: Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: 03680, м. Київ -142, вул. Кржижановського, 3

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.04

Тема дисертації:

1. Комп'ютерне моделювання структури, властивостей порового простору та водневої ємності нанопористого вуглецю

2. Computer modelling of structure, properties of space of pores and hydrogen capacity of nanoporous carbon

Реферат/анотація:

1. У роботі створена імітаційна модель базових структурних перетворень процесу формування нанопористого вуглецю з карбіду кремнію. Обчислювальний експеримент показав, що імітаційна модель відповідає фізичній природі формування нанопористого вуглецю з карбіду кремнію і адекватно моделює його. Результати імітаційного моделювання становлять високоінформативний опис структури і властивостей нанопористого вуглецю за такими параметрами як: густина, питома площа поверхні пор, відношення sp2/sp3, об'єм пор та їх розподіл за розмірами, усадка, воднева ємність. Розроблено реконструкційну модель нанопористого вуглецю, яка за комплексом характеристик, які вона описує (густина, пористість, питома площа поверхні пор, відношення sp2/sp3, об'єм пор, розподіл пор за розмірами, усадка, воднева ємність, розміри атомів, температури утворення, форма вихідного карбіду, підкладка з

карбіду на якій утворюється нанопористий вуглець) відповідає експериментальним даним. Розроблено і адаптовано для нанопористого вуглецю методи обчислення параметрів модельної атомної структури (у т.ч. простору пор). Методами дослідження є методи обчислювальної фізики: молекулярна динаміка, метод Монте-Карло, апарат Вороного-Делоне, імітаційне комп'ютерне моделювання. Розроблено швидкодіючі комп'ютерні програми для реалізації вказаних моделей. Це дозволяє автоматизувати процес і проводити вивчення нанопористого вуглецю, отриманого з карбідів, на системній основі. Моделі, втілені у комп'ютерних програмах, дають можливість досліджувати вплив температури синтезу на параметри структури утвореного нанопористого вуглецю і обчислювати необхідні характеристики. Можливе поліпшення характеристик і уточнення необхідних параметрів моделей.

2. The work established the imitative model of basic structural transformation of process of forming nanoporous carbon from silicon carbide. Computer simulation showed that the imitative model corresponds to the physical nature of the formation of nanoporous carbon from silicon carbide and adequately simulates it. Simulation results provide a highly informative description of the structure and properties of nanoporous carbon for such parameters as: density, specific surface area of pores, sp2/sp3 ratio, pore volume, pore-size distribution, shrinkage, hydrogen capacity. Developed a reconstruction model of nanoporous carbon, which for a set of characteristics it describes: density, porosity, specific surface area of pores, sp2/sp3 ratio, pore volume, pore-size distribution, shrinkage, hydrogen capacity, atom sizes, the temperature of formation, the shape of the initial carbide, carbide substrate on which is formed nanoporous carbon, meets the experimental data. Developed and adapted for nanoporous carbon methods of calculation of parameters of model atomic structure (including pore space). Research methods are the methods of computational physics: molecular dynamics, Monte Carlo method, Voronoi-Delaunay apparatus, imitative computer modelling. Fast computer programs are developed for implementing these models. This allows you to automate the process and conduct the study of carbide-derived nanoporous carbon on a systematic basis. Models, embodied in computer programs, make it possible to investigate the effect of synthesis temperature on the parameters of structure of formed nanoporous carbon and calculate the set of required characteristics. It is possible to improve performance and refine necessary parameters of models.

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. Картузов Валерій Васильович
2. Kartuzov Valeriy Vasilyevich

Кваліфікація: к.ф.-м.н., 01.01.07

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. Іващенко Володимир Іванович
2. Іващенко Володимир Іванович

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. Прилуцький Юрій Іванович
2. Прилуцький Юрій Іванович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02

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	Фірстов Сергій Олексійович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Фірстов Сергій Олексійович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.

