Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0519U000651

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-09-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Маркович Богдан Михайлович
2. Markovych Bogdan

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 01.04.02

Назва наукової спеціальності: Теоретична фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 04-09-2019

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. С. Бандери, 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, 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 35.156.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, 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: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. С. Бандери, 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.17.41 , 29.19.17

Тема дисертації:

1. Квантово-статистичний опис рівноважних характеристик та дифузійних процесів у просторово обмежених металевих системах

2. Quantum-statistical description of equilibrium characteristics and diffusion processes in spatially limited metal systems

Реферат:

1. Дисертація присвячена розробленню квантово-статистичної теорії рівноважних характеристик та дифузійних процесів у просторово обмежених металевих системах на основі базисного підходу та методів нерівноважного статистичного оператора Зубарєва і функціонального інтегрування. Використовуючи модель напівобмеженого «желе» як базисну, отримано нові вирази для термодинамічного потенціалу та s-частинкової функції розподілу електронів напівобмеженого металу з урахуванням дискретності іонної підсистеми. Ці формули мають вигляд розвинень за степенями «різницевого потенціалу». Показано, що нелокальність псевдопотенціалу призводить до необхідності розглядати недіагональні елементи матриці густини електронів. Отримано новий аналітичний вираз для термодинамічного потенціалу напівобмеженого металу в межах моделі «желе», на основі якої розраховано хімічний потенціал, внутрішню та поверхневу енергії. Досліджено вплив міжелектронної кулонівської взаємодії на хімічний потенціал та поверхневу

енергію. Вперше з коректним врахуванням умови електронейтральності розраховано ефективний потенціал парної міжелектронної взаємодії, хімічний потенціал та роботу виходу для тонкої металевої плівки, яка розглядається у межах моделі «желе» та знаходиться у вакуумі або на діелектричному підкладі, та досліджено вплив на них товщини плівки. Розрахунок хімічного потенціалу електронів металевої плівки показав, що врахування кулонівської міжелектронної взаємодії призводить до підсилення осциляційного квантово-розмірного ефекту. Показано, що коректне врахування умови електронейтральності забезпечує правильну поведінку хімічного потенціалу та роботи виходу. Розраховано ефективні потенціали міжелектронної, міжіонної та електрон-іонної взаємодій та досліджено вплив на них площини поділу «метал–вакуум» та поправки на локальне поле. Розвинуто квантово-статистичну теорію опису електродифузійних та в'язко-еластичних електронних процесів напівобмеженого металу з урахуванням дискретності іонної підсистеми металу. Отримано узагальнені рівняння опису цих процесів з урахуванням динамічного екранування. Знайдено нерівноважний статистичний оператор у гауссівському та наступному за ним наближеннях за динамічними електронними кореляціями. Отримано узагальнені рівняння нелінійної гідродинаміки для нерівноважних середніх значень густин електронів та їх імпульсу, які можуть застосовуватись для опису сильно нерівноважних процесів для електронної підсистеми напівобмеженого металу. Отримано систему рівнянь типу Кеттано опису взаємодії газової фази з каталітичною поверхнею металу з урахуванням адсорбційних, десорбційних та хімічних реакцій між адсорбованими атомами. Отримано узагальнені рівняння переносу для середніх нерівноважних значень густин неадсорбованих і адсорбованих атомів для узгодженого опису атомних реакційно-дифузійних процесів у системі «метал–адсорбат–газ» у статистиці Рені, які у разі q=1 співпадають із рівняннями реакційно-дифузійних процесів у статистиці Гіббса. Отримані рівняння є нелінійними та просторово неоднорідними, можуть описувати як сильно, так і слабо нерівноважні процеси. Побудовано математичну модель реакційно-дифузійних процесів для механізму Ленгмюра–Гіншелвуда на поверхні металевого каталізатора, яка дає можливість врахувати особливості протікання хімічних реакцій типу окиснення на поверхні платинового каталізатора. Обґрунтовано та побудовано математичну модель реакційно-дифузійних процесів окиснення CO для механізму Ленгмюра–Гіншелвуда на двовимірній поверхні платинового каталізатора, яка враховує скінченність швидкості десорбції продукту окиснення (CO_2) з поверхні каталізатора. Отримано узагальнені рівняння переносу, які узгоджено описують в'язко-еластичні електронні процеси із дифузійно-електромагнітними процесами для атомів–промоторів (магнітних диполів) на поверхні металу та із реакційно-дифузійними процесами для адсорбованих на поверхні металів атомів. Розроблено підхід для розрахунку площі поперечного перерізу розсіяння іонізованих атомів на вістрі польового іонізаційного детектора, що полягає у поєднанні класичного опису процесу наближення атома до вістря та квантового опису процесу іонізації атома, за допомогою якого розраховано значення площі поперечного перерізу розсіяння іонізованих атомів гелію, які задовільно узгоджуються з експериментальними даними. Отримано нові узагальнені рівняння переносу у дробових похідних для класичної системи частинок в статистиці Рені, у разі дифузійних процесів отримано узагальнені рівняння дифузії у дробових похідних, зокрема, узагальнені рівняння дифузії типу Кеттано, Максвелла–Кеттано для систем з часовою та просторовою нелокальністю.

2. The thesis is devoted to development of a quantum-statistical theory of equilibrium characteristics and diffusion processes in spatially limited metal systems by using the reference system approach, Zubarev's non-equilibrium statistical operator method, and functional integration method. By using the semi-infinite jellium as a reference system, analytic equations for the thermodynamic potential and the s-particle distribution function of electrons of semi-infinite metal are obtained, taking into account discreteness of ion subsystem. These equations are the power expansions of "the difference potential." It is shown that the non-locality of pseudopotential leads to the need to account for non-diagonal elements of the electron density matrix. A new analytic equation for the thermodynamic potential of semi-infinite metal is obtained within the jellium model on the basis of which the chemical potential, internal and surface energies are calculated. An influence of the Coulomb interaction between electrons on the chemical potential and surface energy is estimated. For the first time, the chemical potential and work function for a metal film which is placed either in the vacuum or on a dielectric substrate are calculated with

correct accounting of the electroneutrality condition. An effect of the film thickness on the chemical potential and the work function is studied. The calculation of the chemical potential of electrons in a metal film has shown that taking into account the Coulomb interaction between electrons increases the oscillatory quantum size effect and that the correct account for the electroneutrality condition provides a correct behavior of the chemical potential and work function. The effective potentials of the electron–electron, ion—ion and electron–ion interactions are calculated and an influence of the metal–vacuum separation plane on these potentials and local field correction are investigated. A quantum-statistical theory of electro-diffusion and viscoelastic electron processes of semi-infinite metal is developed, taking into account the discreteness of the ion subsystem of the metal. The generalized equations are obtained taking into account dynamic screening. A non-equilibrium statistical operator in the Gaussian approximation and in the next approximation using dynamic electron correlations is found. The generalized equations of nonlinear hydrodynamics for non-equilibrium average values of electron density and momentum are obtained, which can be used to describe strongly non-equilibrium processes for the electron subsystem of semi-infinite metal. A system of Cattaneo-type equations is obtained for the description of interaction of the gas phase with the catalytic metal surface, taking into account adsorption, desorption, and chemical reactions between adsorbed atoms. The generalized transport equations are obtained for the average non-equilibrium values of densities of non-adsorbed and adsorbed atoms for a consistent description of atomic reaction-diffusion processes in the system “metal–adsorbate–gas” within the Rényi statistics. The obtained equations are nonlinear and spatially inhomogeneous, both strong and weak non-equilibrium processes can be described by them. A mathematical model of reaction-diffusion processes for the Langmuir–Hinshelwood mechanism on the metal catalyst surface is constructed, which enables us to take into account peculiarities of course of the chemical reactions of oxidation-type on the platinum catalyst surface. The mathematical model of reaction-diffusion processes of CO oxidation for the Langmuir–Hinshelwood mechanism on a two-dimensional surface of the platinum catalyst, which takes into account the finiteness of the desorption rate of the oxidation product (CO2) from the catalyst surface, is constructed. The generalized transport equations are obtained, which consistently describe viscoelastic electron processes with diffusion-electromagnetic processes for atoms-promoters (magnetic dipoles) on the metal surface and with reaction-diffusion processes for the adsorbed atoms on the metal surface in catalytic processes. An approach is developed for calculating the cross-sectional area of scattering of ionized atoms on the field ionization tip, which is a combination of the classical description of an atom’s approaching the tip and the quantum description of the ionization of an atom. Using this approach, the values of the cross-sectional area of scattering of ionized helium atoms are calculated, which are in satisfactorily agreement with experimental data. New generalized transport equations with fractional derivatives for a classical system of particles within the Rényi statistics are obtained. In the case of diffusion processes, the generalized diffusion equations with fractional derivatives, in particular, the generalized diffusion equations of the Cattaneo-type, Maxwell–Cattaneo-type for systems with time and spatial nonlocality are obtained.

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. Костробій Петро Петрович
2. Kostrobii Petro P.

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Костробій Петро Петрович
2. Kostrobii Petro P.

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Держко Олег Володимирович
2. Derzhko Oleg V.

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Репецький Станіслав Петрович
2. Repetsky Stanislav Petrovych

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Слюсаренко Юрій Вікторович
2. Sliusarenko Yurii V.

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