Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0406U002977

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-07-2006

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бутько Віктор Григорович
2. Boutko Viktor Grygorovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 08-06-2006

Спеціальність за освітою: 7.070101

Місце роботи здобувача: Донецький фізико-технічний інститут Національної Академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05420497

Місцезнаходження: 83048, Україна, Донецьк, вул. Р. Люксембург, 72

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): Д11.184.01

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Донецький фізико-технічний інститут Національної Академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05420497

Місцезнаходження: 83048, Україна, Донецьк, вул. Р. Люксембург, 72

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.23

Тема дисертації:

1. Електронна щільність і градієнт електричного поля в купратах та рідкісноземельних оксидах

2. Electron density and gradient electrical field in cuprats and rare-earth oxides

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена застосуванню модифікованого статистичного методу до розрахунків електронних властивостей металооксидних кристалів. Продемонстровано ефективність методу при розрахунках багатокомпонентних кристалів зі змішаним типом хімічного зв'язку і великим числом атомів в елементарній комірці.Детальне дослідження розподілу електронної щільності в сполуці Y1-xPrxBa2CuO7 дозволило зняти протиріччя між структурними даними нейтронографічних і рентгенівських вимірів цієї системи.У рамках модифікованого статистичного методу отриманий гарний кількісний опис тензора градієнта електричного поля як при стиску, так і при зміні стехіометрії системи. Виявлена зміна знака похідної квадрупольної константи за тиском при переході від орторомбічної структури до тетрагональної пояснює істотний вплив нестійкості ґратки La-Sr оксидів на електричні надтонкі взаємодії. Було проведено вивчення можливості зміни валентності рідкісноземельних іонів під впливом надвисокого тиску при незмінності кристалічної структури сполук. Проведені розрахунки розподілу електронної щільності кристалів PrO2 і Sm2O3 при

різних ступенях стиску й обчислені відповідні середні заряди іонів.Відповідно до принципу електронейтральності Полінга аналізується припущення про те, що динаміка зміни величини середнього заряду іона може служити мірою нестійкості системи. В такому ракурсі розглянутий структурний фазовий перехід, ініційований високим тиском, в кристалі EuO. Результати розрахунків добре корелюються з експериментальними даними.

2. The thesis is devoted to application of the modified statistical method for calculating electronic properties of metal oxide crystals. The method is proved to be efficient for study of many-component crystals with the mixed type of chemical bond and a large number of atoms in the unit cell. The detail investigations with the aim of finding the electronic density distribution in Yr1-xPrxBa2Cu3O7 make it possible to remove the contradictory between structural data of neutron graphical and X-ray studies of this system. In the frameworks of the modified statistical method a good qualitative description of the gradient tensor of electrical field have been achieved both under pressure and under changes of staichuometry. The revealed change of sign of the derivative of quadruple constant respect to pressure at transition from orthorhombic to tetrorombic system explains the key role of instability of La-Sr lattice on electrical super subtle interaction. The possibility of valency changing rare-earth ions under high pressure has been carried out even though the crystal structure of the compound under investigation be unchanged. The calculations of the electron density distribution for PrO2 and Sm2O3 at different pressures and corresponding average charges of ions have been determined. Following the electro neutral principle of Polling the supposition that the change of the average charge value can be the measure of system instability. In this fashion the structural phase transition in EuO crystal induced by high pressureis is treated. The results of calculation are in good agreement with experimental data.

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. Гусєв Олександр Анатолійович
2. Gusev Oleksandr Anatoliyovych

Кваліфікація: к.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. Погосов В.В.
2. Погосов В.В.

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.14

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. Троіцька О.П.
2. Троіцька О.П.

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради ВАрюхін Віктор Миколайович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні ВАрюхін Віктор Миколайович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.