Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0408U003304

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-07-2008

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Янчицький Богдан Зіновійович
2. Yanchyts'kyj Bogdan Zinovijovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

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: 03-07-2008

Спеціальність за освітою: 7.070101

Місце роботи здобувача: Інститут магнетизму НАН та МОН України

Код за ЄДРПОУ: 23494128

Місцезнаходження: 03142, м. Київ-142, пр.Вернадського 36-б

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 26.248.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут магнетизму Національної академії наук України та Міністерства освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 23494128

Місцезнаходження: Бульвар Академіка Вернадського, будинок 36-Б, 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 магнетизму НАН та МОН України

Код за ЄДРПОУ: 23494128

Місцезнаходження: 03142, м. Київ-142, пр.Вернадського 36-б

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.03

Тема дисертації:

1. Теоретичне дослідження впливу атомів азоту на електронну будову і параметри надтонкої взаємодії в гцк залізі

2. Theoretical study of influence of nitrogen on electronic structure and hyperfine interactions in fcc iron

Реферат/анотація:

1. В роботі розроблено алгоритм побудови структур, що моделюють багатокомпонентні сплави, з автоматичним знаходженням просторової групи і побудови оптимальної елементарної клітини для проведення обчислень електронної будови з перших принципів. На основі цього алгоритму розроблена комп'ютерна програма, застосування якої суттєво розширює можливості комп'ютерного моделювання атомної структури і фізичних властивостей кристалічних матеріалів. Обчислено електронну будову і параметри надтонкої взаємодії в нітриді Fe4N. Встановлено, що досить великий від'ємний внесок в градієнт електричного поля на ядрі атома Fe2 обумовлений асиметрією розподілу 2s і 2p електронів азоту. Обчисленно електронну будову і параметри надтонкої взаємодії для двох модельних структур Fe8N. Встановлено, що утворення так званих "гантельних" конфігурацій знижує повну енергію системи.

Обчислення засвідчують наявність градієнта електричного поля на ядрах атомів заліза, що мають атом азоту в другій і третій координаційних сферах. Це не враховується сучасними моделями інтерпретації Мессбауерівських спектрів азотистого аустеніту. Обчислено внесок в квадрупольне розщеплення ядерних рівнів обумовлених деформацією гратки.

2. Numerical algorithm and computer program have been developed to find space symmetry for three dimensional periodic solids that makes treatment of space symmetry more simple and easy. To test the ab-initio method itself, for the Fe4N nitride electronic structure and hyperfine parameters have been calculated and interpreted in details. To investigate hyperfine interactions in nitrogen austenite, two model structures of the Fe8N composition were created in such a way to provide the most important nitrogen surrounding for iron atoms. Calculated electric field gradients (EFG) on the iron nuclei show significant quad-rupole splitting of nuclear levels for iron atoms that are at significant distances (second and third neighbors) from nitrogen. This finding (especially for atoms with nitrogen at the third coordination shell) is not taken into account by modern inter-pretations of experimental M?ssbauer spectra. It is also shown that effects of local atomic distortions change the value of quad-ruple splitting significantly and therefore must be taken into account, as the local atomic distortions take always place in interstitial solid solutions.

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. Тимошевський Андрій Миколайович

2. Timoshevskii Andrey

Кваліфікація: к.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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Погорілий Анатолій Миколайович
2. Погорілий Анатолій Миколайович

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. 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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Бар'яхтар Віктор Григорович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Бар'яхтар Віктор Григорович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.