Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0405U004619

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-12-2005

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Петрова Натал ія Вікторівна
2. Petrova Natalia Viktorovna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.04

Назва наукової спеціальності: Фізична електроніка

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 24-11-2005

Спеціальність за освітою: 7.070101

Місце роботи здобувача: Інститут фізики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: 03680, МСП, м.Київ, проспект Науки, 46

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 26.159.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: проспект Науки, 46, м. Київ, Київська обл., 03028, 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 фізики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417302

Місцезнаходження: 03680, МСП, м.Київ, проспект Науки, 46

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.29.41

Тема дисертації:

1. Моделювання адсорбції газів на поверхні перехідних металів

2. Modeling of gas adsorption on transition metal surfaces

Реферат/анотація:

1. В дисертаційній роботі представлено результати моделювання адсорбції газів на поверхні перехідних металів. Головну увагу приділено адсорбції водню на поверхні (110) W та Mo, структурам та кінетиці адсорбції кисню та CO на поверхні Pt(111), а також каталітичній реакції окислення CO. В роботі проведено Монте Карло моделювання "в реальному часі" кінетики низькотемпературної адсорбції водню та дейтерію на поверхні W(110) та Mo(110) та проаналізовано роль внутрішніх та зовнішніх передстанів у дисоціативній адсорбції водню на поверхні перехідних металів. Однією з головних умов при моделюванні формування структур адсорбованих плівок є адекватне врахування латеральної взаємодії між адсорбованими молекулами, яке включає як пряму взаємодію (електростатичну та обмінну), так і непряму (через електрони підкладинки). Так, правильне урахування латеральної взаємодії при моделюванні дозволило пояснити механізм формування структур плівок CO на платині. Запропоновано нову модель каталітичної реакції окислення CO, у відповідності з якою хімічно активними є атоми кисню, що розташовані в hcp адсорбційних центрах на поверхні Pt(111). В рамках цієї моделі ТПД спектри для CO-O плівок, що описують швидкість реакції

окислення, відтворюють експериментальні спектри як для випадку ідеальної p(2x2) структури плівки CO-O/Pt(111), так і для плівки із структурними дефектами.

2. The results of modeling of gas adsorption on transition metal surfaces are presented. Main attention is focused on hydrogen adsorption on (110) W and Mo surfaces, on the structures and adsorption kinetics of oxygen and CO on Pt(111) and on the catalytic CO oxidation. Kinetics of low-temperature hydrogen and deuterium adsorption on W(110) and Mo(10) surfaces have been studied by the "real-time" Monte Carlo simulations. The role of the intrinsic and extrinsic precursor states in hydrogen dissociative adsorption on the transition metal surfaces is analyzed. Recently reported qualitative dependence of the adsorption characteristics on variation of the H2 flux is described in terms of the dynamical equilibrium between incident and desorption fluxes and improved conditions for accommodations for the hydrogen molecules at high incident fluxes. One of the main aspects in the modeling is an adequate account of lateral interaction of adsorbed particles, which includes both direct (electrostatic and exchange) andindirect (through substrate electrons) interactions. In particular, proper account of the lateral interaction has allowed for explanation of the mechanism of formation of the CO and oxygen structures on the Pt(111) surface. A new model of catalytic CO oxidation reaction, in which only oxygen atoms in hcp-type threefold adsorption sites on the Pt(111) surface are chemically active, is suggested. Within this model, the TPD spectra of the coadsorbed CO+O films, which represent the rate of CO oxidation, do resemble experimental data for a perfectly ordered p(2x2) structure of CO+O/Pt(111) film as well as for the film with structural imperfections.

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. Птушинський Юрій Григорович
2. Ptushinskii Yuri Grygorovych

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.04

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. Литовченко Володимир Григорович

2. Литовченко Володимир Григорович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.04

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. Браун Олег Михайлович

2. Браун Олег Михайлович

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