Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0416U001033

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-01-2016

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мехед Олександр Анатолійович
2. Mekhed Alexander Anatolievich

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.13

Назва наукової спеціальності: Фізика металів

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 30-12-2015

Спеціальність за освітою: 8.080202

Місце роботи здобувача: Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: 03142, м. Київ, бул. Вернадського, 36

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 26.168.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: бульв. акад. Вернадського, 36, 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 металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: 03142, м. Київ, бул. Вернадського, 36

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. Структурно-фазовий стан і властивості сплавів Fe-Al-C з нестехіометричною карбідною фазою

2. Structural-phase state and properties of Fe-Al-C alloys with non-stoichiometric carbide phase

Реферат/анотація:

1. Робота присвячена дослідженню впливу нестехіометричної карбідної фази на структурно-фазовий стан та властивості сплавів системи Fe-Al-C. Неможливість утворення стехіометричної K-фази пов'язана з появою вироджених станів на рівні Фермі, що підсилює нестійкість елементарної комірки до деформацій, що знижують її симетрію. Нестехіометрія по вуглецю підсилює Fe-C зв'язки, а по алюмінію, навпаки, послаблює. Різниця ентальпії утворення різних комірок нестехіометричної K-фази досягала 40%. Енергетично найбільш вигідним складом K-фази виявилася нестехіометрична сполука Fe3AlC0.66. Досліджено вплив нестехіометрії на параметри решітки, магнітні властивості та електронну будову K-фази. Обґрунтована можливість епітаксійного росту кристалів алмазу на поверхні K-фази як підкладинки і досліджено її електронну будову та енергетичні параметри.

2. The present work is dedicated to the study of the non-stoichiometric K-phase using density-functional theory as implemented in WIEN2k package. It was established that degenerate electron states at the Fermi level make stoichiometric K-phase susceptible to a symmetry degenerating deformations. Non-stoichiometry by carbon

increases stability of a unit cell as a whole due to delocatization of electronic states densities of iron and carbon atoms and due to appearance of new states at -7 - -6 eV which increases the strength of Fe-C bonds, while non-stoichiometry by aluminum weakens Fe-C bonds. It was established that Fe3AlC0.66 composition has the minimal value of formation enthalpy and the difference of formation enthalpy of various compounds was as high as 40%. Unit cell parameters of magnetic K-phase varied between 0.372 to 0.375 nm and were smaller by 0.4-0.8% comparing to stoichiometric one. Magnetization value of non-stoichiometric Fe3AlC0.66 compound was the closest to the experimental one. The possibility of epitaxial growth of diamond crystals on K-phase substrate was shown. (200) plane was established to be the most suitable plane for the diamond growth. The electron structure and energetic parameters of a substrate was investigated. It was shown that the substrate with at least four intermediate layers of K-phase exhibits signs of stability such as negative enthalpy of formation and Fermi level falling on minimum of densities of states.

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. Андрющенко Владислав Андрійович
2. Andryushchenko Vladislav Andreevich

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кокорін Володимир Володимирович

2. Кокорін Володимир Володимирович

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. Ляшенко Юрій Олексійович

2. Ляшенко Юрій Олексійович

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 Івасишин Орест Михайлович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Івасишин Орест Михайлович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.