Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0406U004667

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-11-2006

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Єфімова Катерина Олександрівна
2. Yefimova Kateryna Aleksandrovna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

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: 09-11-2006

Спеціальність за освітою: 0406

Місце роботи здобувача: Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: 03680, м. Київ -142, вул. Кржижановського, 3

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 26.207.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Кржижановського, 3, 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 проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: 03680, м. Київ -142, вул. Кржижановського, 3

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.17

Тема дисертації:

1. Теоретичне дослідження процесів інтеркаляції шаруватих структур з залученням методів комп'ютерного моделювання

2. Theoretical investigation of intercalation processes of layered structures by computer simulation

Реферат/анотація:

1. Сформульовано основні положення узагальненої фізичної моделі процесу інтеркаляції щодо використання в нанотехнології сполук з шаруватими структурами. Вперше на базі цих положень з використанням методу випадкових блукань розроблено математичні моделі, виконано їх алгоритмізацію та створений цілісний програмний комплекс, що моделює найбільш суттєву технологічну стадію процесів інтеркаляції та бі-інтеркаляції - перенос інтеркальованих атомів (молекул) у шаруватій структурі. Порівняння результатів проведених обчислювальних експериментів з результатами натурних експериментів підтверджують адекватність застосованого імітаційного підходу. Досліджено вплив коефіцієнту дифузії та швидкості дрейфу на рух фронту інтеркалята в шаруватій структурі. Встановлено, що дрейфова складова потоку значно інтенсифікую процес інтеркаляції порівняно з дифузійним вкладом. На базі цих досліджень надано

рекомендації щодо отримання рівноважних інтеркалятів та оптимізації режимів нанотехнології діхалькогенідів d-перехідних металів.З залученням псевдопотенціального підходу досліджено вплив міжшарової та міжатомної взаємодії на проходження процесу інтеркаляції атомарного водню в шаруваті структури. Показано, що вищезазначені системи можуть бути інтеркальовані значною кількістю водню при збереженні вихідного складу та структурних характеристик шаруватих структур.

2. The main principles of generalized physical model of intercalation process of nanotechnology of compound with layered structure are formulated. For the first time the mathematical model are worked out on the base of there principles with using randomwalk method, algoritming of the model are carried out, and its computer programs complex are developed. This program complex model the most essential technological stage of intercalation and bi-intercalation processes - a transfer of intercalations particles in layered structure. A comparison of realized computing results with natural experiment ones confirms an adequacy of used imitating approach. The influence of diffusion coefficient and drift velocity on the motion of intercalate front in body of layered structure are investigated. It is proved, that drift-component of flow intensifies considerably the intercalation process in comparison with a diffusion contribution. On the base of these investigations the recommendations about production of equilibrium intercalates and optimization of a mode of nanotechnology of layered d-transition metal dihalcogenides are presented. The influence of interlayer and interatomic interaction on a course passage of intercalation process of atomic hydrogen to the layered structures are investigation with pseudopotential approach. It is showed, that the above mention system may be intercalated by bigger quantity of hydrogen in calculation on unit cell under preservation of initial composition and structural character of layered structure.

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. Картузов Валерій Васильович

2. Kartuzov Valery Vasilievich

Кваліфікація: к.ф.-м.н., 01.01.07

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. Подрезов Юрій Миколайович
2. Подрезов Юрій 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. Прилуцький Юрій Іванович
2. Прилуцький Юрій Іванович

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