Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0418U003680

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 13-11-2018

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Широкорад Дмитро Вікторович
2. Shyrokorad Dmytro Viktorovych

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: 30-10-2018

Спеціальність за освітою: Системний аналіз і управління

Місце роботи здобувача: Запорізький національний технічний університет

Код за ЄДРПОУ: 02070849

Місцезнаходження: вул. Жуковського, 64, м. Запоріжжя, Запорізький р-н., Запорізька обл., 69063, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.168.02

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: Запорізький національний технічний університет

Код за ЄДРПОУ: 02070849

Місцезнаходження: вул. Жуковського, 64, м. Запоріжжя, Запорізький р-н., Запорізька обл., 69063, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19

Тема дисертації:

1. Еволюція вільних металевих кластерів при бомбардуванні низькоенергетичними кластерами аргону

2. Evolution of free metal clusters under low-energy argon clusters bombardment

Реферат/анотація:

1. Розглянуто еволюції моно- та біметалевих метастабільних янусоподібних кластерів на інтервалах протягом 5, 100 і 500 пс після взаємодії з атомами Ar та кластерами Ar2 та Ar13 з енергіями до 1.4 кеВ. Кластери Cu, Cu-Au, Ni-Al та Cu-Bi мали різні енергії когезії, теплоту перемішування компонентів та розміри від 26 до 390 атомів. Моделювання виконувалося методом класичної молекулярної динаміки з використанням технологій паралельного програмування та потенціалів міжатомної взаємодії EAM та Акланда. Показано значне зростання виходів розпилення компонентів, у деяких випадках зі зміною компоненти, що переважно розпилюється, та інтенсивності переміщень атомів зі збільшенням розміру частинки аргону та енергії, що також супроводжується сильним зростанням потенціальної енергії та температури розігріву кластера. Простежено перехід від каскадно-рекойлового механізму атомних переміщень до термічного з відповідним впливом теплоти перемішування на процеси еволюції біметалевих кластерів, а саме, температуру, взаємне перемішування та кінцеві значення виходів розпилення компонентів. Отримано значний синергетичний

ефект зростання розпилення кластерів при бомбардуванні кластерами Ar2 та Ar13 порівняно з атомами Ar. Встановлено формування оболонкових наноструктур з підвищеною кількістю атомів Cu у ядрах і атомів Bi у замкненій оболонці, а також в меншій мірі, зі збільшеною кількістю атомів Au у зовнішньому шарі, відповідно, в кластерах Cu-Bi та Cu-Au під дією кластерів Ar13. У випадку Ar1 при відносно низькій температурі і незначному розпиленні спостерігається незавершеність атомної оболонки у кластері Cu-Bi та значна неоднорідність перемішування компонентів у кластері Cu-Au.

2. The evolution of mono- and bimetallic metastable Janus-like clusters at 5, 100 and 500 ps time intervals after the impacts with Ar1, Ar2 and Ar13 particles with energies up to 1.4 keV is considered. Cu, Cu-Au, Ni-Al and Cu-Bi clusters which consisted of 26 to 390 atoms and had different mixing heat of their components were investigated. The bombardment was carried out with Ar1, Ar2 and Ar13 particles with energies from 1 to 1400 eV. The simulation was performed in the framework of classical molecular dynamics using the potentials of EAM and Akland to describe the interactions between metal atoms with MPI and OpenMP technologies implementation. A significant increase of the sputtering yields, with a change of the mainly sputtered component in some cases, and atoms' displacement intensities with an increase in the size and energy of the bombarding particle along with strong growth of the potential energy and heating temperature of the clusters was shown. A gradual transition from the cascade-recoil to thermal mixing and sputtering mechanism in the process of the evolution of the bimetal cluster with increased temperature and intermixing of the components supported by the negative mixing heat was traced. Notable synergistic effect for clusters' sputtering yields growth was found in the case of Ar2 and Ar13 bombardment compared to Ar bombardment. The formation of shell nanostructures with increased number of Cu atoms in the cores and Bi atoms in the closed shell or to a lesser extent increased number of Au atoms in the outer layer under the Ar13 particles bombardment of Cu-Bi and Cu-Au clusters correspondently was investigated. For the case of Ar1 at relatively low temperatures and insignificant sputtering, an incompleteness of the atomic shell in the Cu-Bi cluster and a significant heterogeneity of the components' mixing in the Cu-Au cluster were observed.

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. Корніч Григорій Володимирович

2. Kornich Grygorij Volodymyrovych

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. Ченакін Сергій Петрович
2. Chenakin Sergij Petrovych

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. Бажин Анатолій Іванович
2. Bazhyn Anatolij Ivanovych

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 Татаренко Валентин Андрійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Татаренко Валентин Андрійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.