Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0421U102803

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 01-06-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дуда Євген Вікторович
2. Duda Yevhen V.

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: 11-05-2021

Спеціальність за освітою: фізика конденсованого стану

Місце роботи здобувача: Запорізький державний медичний університет

Код за ЄДРПОУ: 02010741

Місцезнаходження: проспект Маяковського, буд. 26, м. Запоріжжя, Запорізький р-н., Запорізька обл., 69035, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство охорони здоров`я 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 Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: бульвар Академіка Вернадського, буд. 36, м. Київ, 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: Національний університет "Запорізька політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02070849

Місцезнаходження: вул. Жуковського, буд. 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: 29.19.17

Тема дисертації:

1. Прискорене молекулярно-динамічне моделювання елементарних процесів дифузії в металах

2. Accelerated molecular-dynamics simulation of elementary diffusion processes in metals

Реферат/анотація:

1. Розроблено нові підходи до використання методів прискореного молекуляр-но-динамічного моделювання елементарних процесів дифузії атомів, а саме: гіпердинаміки та температурно-прискореної динаміки. Для підвищення якості результатів моделювання в рамках гіпердинаміки, запропоновано викори-стовувати такі зміщені потенціали міжатомної взаємодії, введення яких залишає незмінною форму поверхні потенціальної енергії навколо енергетичного мінімуму системи. Розроблено методику побудови відповідних зміщених потенціалів. У рамках температурно-прискореної динаміки запропоновано змінювати потенціал міжатомної взаємодії так, щоб за підвищення температури атомних систем, частоти нормальних мод коливань змінювались на відому наперед задану величину. Розроблено методику поєднання описаних підходів до прискореного молекулярно-динамічного моделювання в рамках єдиного методу – температурно-прискореної гіпердинаміки.

2. New approaches to the applications of methods of accelerated molecular-dynamics simulation of elementary processes of diffusion, namely hyperdynamics and temperature-accelerated dynamics, have been developed. To improve the quality of the hyperdynamics method, it is proposed to use such biased potentials of interatomic interaction, the implementation of which leaves the unchanged shape of the surface of the potential energy around the energy minimum of the system. The method of construction of corresponding displaced potentials is developed. For temperature-accelerated dynamics, it is proposed to change the potential of interatomic interaction so that, at elevated temperatures of atomic systems, the normal mode frequencies change by a known preset value. The method of combining the described approaches with accelerated molecular-dynamic simulation of the temperature-accelerated hyperdynamics is developed.

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 Hryhorii V.

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. Філатов Олександр Валентинович

2. Filatov Oleksandr V.

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.13

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. Гранкін Віктор Павлович

2. Hrankin Victor P.

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.