Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0406U003411

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-07-2006

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Щигло Олег Іванович
2. Shchyglo Oleg Ivanovich

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: 04-07-2006

Спеціальність за освітою: 7.090801

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

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: 36, бульвар Вернадського, 03142, Київ

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): Д26.168.02

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

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: 36, бульвар Вернадського, 03142, Київ

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. Багаточастинкові деформаційні ефекти у сплавах заміщення з атомним розмірним неспівпадінням.

2. Many-body strain-induced effects in substitutional alloys with atomic size mismatch

Реферат/анотація:

1. Розроблена ітераційна процедура топологічного уточнення, яка дозволяє послідовно конструювати Фур'є-компоненти потенціалу міжатомної взаємодії в сплаві на основі даних першопринципних розрахунків повних енергій упорядкованих структур для сплаву із заданим складом. Деформаційні ефекти, обумовлені атомним розмірним неспівпадінням, параметризовані в термінах узагальнених багаточастинкових сил Канзакі. Процедура продемонстрована на прикладі сплаву Cu3Au з ГЦК кристалічною решіткою. Показано, що як парні, так і непарні сили Канзакі швидко зменшуються за абсолютною величиною із зростанням міжатомної відстані, причому абсолютна величина непарних сил суттєво менше парних. Запропоновані методи можуть бути використані при дослідженні не лише сплавів, але й інших кристалів (наприклад, напівпровідників, магнетиків та низьковимірних систем).

2. The iteration topological refinement procedure was developed. The procedure allows successively constructing Fourier-components of the interatomic potential in binary alloys using the data of ab-initio calculations of full energies of ordered structures with chosen composition. The strain-induced effects caused by the atomic size

mismatch are parameterized in terms of generalized Kanzaki forces. The procedure was demonstrated on the example of Cu3Au alloy with FCC crystal lattice. It was shown, that two- and many-body forces rapidly decay by the absolute value with the increase of the interatomic distance, and the absolute value of many-body forces mach smaller then the absolute value of two-body forces. The proposed methods can be used not only for the alloys treatment, but also for the study of other alloy systems (for example semiconductors, magnetics and low dimensional systems).

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. Бугаєв Володимир Миколайович
2. Bugaev Vladimir Nikolaevich

Кваліфікація: к.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. Загинайченко Світлана Юріївна

2. Загинайченко Світлана Юріївна

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. Куліш Микола Полікарпович

2. Куліш Микола Полікарпович

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 Шпак Анатолій Петрович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Шпак Анатолій Петрович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.