# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0412U004326

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 18-10-2012

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**

## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Слепічева Маргарита Олександрівна

2. Slepicheva Margarita Aleksandrovna

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** кандидат наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 01.05.02

**Назва наукової спеціальності:** Математичне моделювання та обчислювальні методи

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** Не застосовується

**Дата захисту:** 24-09-2012

**Спеціальність за освітою:** 8.080202

**Місце роботи здобувача:** Національний аерокосмічний університет ім. М.Є. Жуковського "Харківський авіаційний інститут"

**Код за ЄДРПОУ:** 02066769

**Місцезнаходження:** Україна, 61070, м. Харків, вул. Чкалова, 17

**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 64.051.09

**Повне найменування юридичної особи:** Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

**Код за ЄДРПОУ:** 02071205

**Місцезнаходження:** майдан Свободи, 4, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61022, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

**Повне найменування юридичної особи:** Національний аерокосмічний університет ім. М.Є. Жуковського "Харківський авіаційний інститут"

**Код за ЄДРПОУ:** 02066769

**Місцезнаходження:** Україна, 61070, м. Харків, вул. Чкалова, 17

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## V. Відомості про дисертацію

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 27.41.23

**Тема дисертації:**

1. Подійне моделювання адсорбції молекулярного водню вуглецевими наноструктурами

2. An Event Simulation of Molecular Hydrogen Adsorption by Carbon Nanostructures

**Реферат/анотація:**

1. Робота присвячена розв'язанню актуальної науково-технічної задачі щодо розвитку та ефективного використання методів обчислювальної математики стосовно вирішення проблем дослідження та вдосконалення об'єктів накопичення енергії. Розроблено математичну дискретно-подійну модель процесу адсорбції молекулярного водню вуглецевими наноструктурами, в якій використовуються прямокутні потенціали парної взаємодії; це дозволяє істотно збільшити кількість модельних об'єктів у системі без збільшення часу моделювання. Розроблено обчислювальний подійний метод підтримки постійного тиску в молекулярній системі. Розроблено методи прискорення розрахунків процесу адсорбції водню вуглецевими наноструктурами. Розроблено схему проведення обчислювального експерименту по адсорбції молекулярного водню на поверхні вуглецевих наноструктур. Чисельний експеримент включає в себе етапи спостереження процесу встановлення, багаторазового зняття інформації, переходу до наступного рівня тиску при постійній температурі. Достовірність запропонованих обчислювальних методів та результатів

розрахункових досліджень підтверджена практично при вирішенні задачі дослідження параметрів адсорбції водню вуглецевими наноструктурами.

2. The thesis is devoted to the solution of topical scientific task of development of mathematical models and calculation methods for study the adsorption of molecular hydrogen by carbon nanostructures to increase the efficiency of hydrogen batteries. The mathematical event-driven model of the molecular hydrogen adsorption by carbon nanostructures, which uses a rectangular two-body interaction potentials, is developed. This can significantly increase the number of model objects in the system without increasing the simulation time. Computational event-driven method for maintaining constant pressure in the molecular system is developed. The methods of acceleration calculations of the process of hydrogen adsorption by carbon nanostructures are developed. The scheme of numerical experiments of the molecular hydrogen adsorption on the surface of carbon nanostructures is developed. The numerical experiment includes the steps of monitoring the process of establishing, repeated removal of information, go to the next level of pressure at constant temperature. The reliability of the proposed computational methods and results of computational studies confirmed practically when solving the problem the study of hydrogen adsorption parameters of carbon nanostructures.

**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. Чернишов Юрій Костянтинович
2. Chernyshev Yury Constantinovich

**Кваліфікація:** к.т.н., 05.13.12

**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. Ванін Віктор Антонович

2. Ванін Віктор Антонович

**Кваліфікація:** д.т.н., 01.05.02

**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. Лазурик Валентин Тимофійович

2. Лазурик Валентин Тимофійович

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., 01.04.16

**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** Жолткевич Григорій Миколайович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні**

Жолткевич Григорій Миколайович

**Відповідальний за підготовку облікових документів**

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності**




Юрченко Т.А.