Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0409U002862

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 24-06-2009

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Калькута Сергій Анатолійович

2. Kalkuta Sergiy Anatoliyovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.02

Назва наукової спеціальності: Теоретична фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 18-06-2009

Спеціальність за освітою: 7.090801

Місце роботи здобувача: Інститут магнетизму НАН та МОН України

Код за ЄДРПОУ: 23494128

Місцезнаходження: 03142, м. Київ-142, пр.Вернадського 36-б

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 26.248.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут магнетизму Національної академії наук України та Міністерства освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 23494128

Місцезнаходження: Бульвар Академіка Вернадського, будинок 36-Б, 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 магнетизму НАН та МОН України

Код за ЄДРПОУ: 23494128

Місцезнаходження: 03142, м. Київ-142, пр.Вернадського 36-б

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. Теоретичне дослідження кристалічної будови і електронної структури йонного провідника La0.5Li0.5TiO3
2. Theoretical study of a crystal structure and electronic structure of an ionic conductor of La0.5Li0.5TiO3

Реферат/анотація:

1. Дослідження проведено високоточним першопринципним методом FLAPW. На основі проведенних обчислень встановлено, що атомам лантану енергетично вигідно впорядковуватись в площинах, а йонам літію вигідно займати позиції в центрах граней кубів, утворених атомами титану. В роботі проведено аналіз кількості літієвих вакансій, що беруть участь в йонній провідності. Методом першопринципного моделювання досліджено імовірні шляхи дифузії йона літію в гратці La0.5Li0.5TiO3. Обчислено величину енергетичного бар'єру, який має подолати йон літію при дифузії. Проведено порівняння з існуючими експериментальними даними. На основі результатів моделювання атомної будови сполуки La0.5Li0.5TiO3, пропонується оптимізувати ефект йонної провідності цієї сполуки шляхом часткового заміщення атомів лантану атомами церію LaxCe0.5-xLixTiO3. Ця сполука є діелектриком і має бути літієвим провідником. Методом Монте-Карло проведено обчислення залежності кількості літієвих вакансій від концентрації йонів

літію при різних температурах в гіпотетичній сполуці LaxCe0.5-xLixTiO3 і в сполуці La(2-x)/3LixTiO3. Показано, що кількість літієвих вакансій, які беруть участь в провідності, суттєво більша в LaxCe0.5-xLixTiO3.

2. Researches are carried out by high-precision ab-initio method (FLAPW). On the basis of the performed calculations, it is determined that the ordering in layers of lanthanum atoms and location of the lithium ions in the centers of verges of cubes, formed by the atoms of titan are energy advantageously. The analysis of number of lithium vacancies participating in ionic conductivity is carried out. The possible ways of diffusion of lithium ion in La0.5Li0.5TiO3 grate are studied by the ab-initio method. The comparison with experimental data is made. Taking into account the simulation results of atomic build of La0.5Li0.5TiO3 compound, it is suggested to optimize the effect ionic conductivity of this compound by means of partial substitution of the lanthanum atoms to the cerium ones. This compound is a dielectric and must be a lithium conductor. Dependences of number of lithium vacancies from concentration of lithium ions at different temperatures in hypothetical LaxCe0.5-xLixTiO3 compound and in La(2-x)/3LixTiO3 compound was calculated by the Monte-Carlo method. It is determined that the number of lithium vacancies participating in conductivity is essentially more in LaxCe0.5-xLixTiO3.

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. Тимошевський Андрій Миколайович
2. Tymoshevskii Andrij Mykolayovych

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. Іващенко Володимир Іванович

2. Іващенко Володимир Іванович

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. Білоус Анатолій Григорович

2. Білоус Анатолій Григорович

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.01

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 Бар'яхтар Віктор Григорович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Бар'яхтар Віктор Григорович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.