Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0408U002327

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-05-2008

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Поживатенко Віталій Володимирович
2. Pozhivatenko Vitaliy Volodimirovich

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.01

Назва наукової спеціальності: Фізика приладів, елементів і систем

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 25-04-2008

Спеціальність за освітою: 0701

Місце роботи здобувача: Миколаївська філія Європейського університету

Код за ЄДРПОУ: 24366800

Місцезнаходження: 54010, м.Миколаїв, вул.Морехідна, 2а

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 41.052.06

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: Миколаївська філія Європейського університету

Код за ЄДРПОУ: 24366800

Місцезнаходження: 54010, м.Миколаїв, вул.Морехідна, 2а

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.03.45

Тема дисертації:

1. Моделювання ієрархічних процесів у хальконідах лужноземельних металів під тиском

2. The modeling of the hierarchical processes in the alkaline-earth metals chalcogenides under pressure

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена розробці нового підходу до розрахунків властивостей халькогенідів лужноземельних металів (ХЛЗМ). В рамках єдиного розрахункового методу, який поєднує теорію функціонала електронної густини, метод зберігаючого норму псевдопотенціала та врахування поправок самодії проведено вивчення рівноважних властивостей лужноземельних металів та їх халькогенідів (рівноважні атомні об'єми, повні енергії, досліджена стабільність кристалічних структур), властивостей електронної підсистеми (електронні зонні структури та їх особливості), властивостей під тиском (рівняння стану, структурні фазові перетворення гцк - оцк в лужноземельних металах та B1 - B2 в халькогенідах лужноземельних металів під тиском, індукований тиском перехід діелектрик - метал, змінювання властивостей електронної підсистеми під тиском). Запропоновано метод ієрархічного скорочення помилок НЛГ-розрахунків. Для шести рівнянь стану отримані характеристики фазових перетворень в ХЛЗМ. Показано, що в даному підході можна обмежитись рівнянням стану Берча для опису поведінки ХЛЗМ при помірних тисках.

2. Dissertation devote to the working out new approach for calculation properties of the alkaline-earth metals chalcogenides (AEMC). In joint calculation method which union the electron density functional theory, the norm-conserving pseudopotential method and self-interaction correction put into practice the study of the equilibrium properties alkaline-earth metals and their chalcogenides (equilibrium atomic volumes, total energy, research of the stability of the crystal structures), properties of the electron subsystem (electron band structures and their peculiarities), the properties under pressure (the equations of state, structural phase transition fcc-bcc in alkaline-earth metals and B1 - B2 in alkaline-earth metals chalcogenides under pressures, pressure induced dielectric - metal transition, change of the electron subsystem properties under pressure). The method for the hierarchically error reduction in the LDA-calculation is proposed. Phase transition characteristics of AEMC were calculated for the six states of equations. It was shown that Birch state of equation with the used assumptions is precise enough for AEMC behavior description under moderate pressures.

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. Дроздов В.О.
2. Drozdov V.A.

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.10

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. Гохман Олександр Рафаїлович

2. Гохман Олександр Рафаїлович

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. Муленко Іван Олексійович

2. Муленко Іван Олексійович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.08

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 Русов В.Д.

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Русов В.Д.

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.