Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0404U003167

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-07-2004

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Павлов Євген Валерійович
2. Pavlov Yevgen Valerijovych

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: 21-06-2004

Спеціальність за освітою: 0620

Місце роботи здобувача: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

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 26.001.23

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 60, м. Київ, Київська обл., 01033, 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: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: 01033, м. Київ, вул. Володимирська, 64

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.15

Тема дисертації:

1. Розрахунок потенціалу міжатомної взаємодії і міжатомних кореляцій в кристалах з застосуванням псевдопотенціалів

2. Calculations of interatomic interaction potential and interatomic correlations in crystals with using the pseudopotentials

Реферат/анотація:

1. Дисертацію присвячено розвитку електронної теорії опису міжатомних кореляцій нижче температури фазового переходу порядок-безлад. При цьому приділена увага опису міжатомної взаємодії, яка є визначальним фактором процесу впорядкування сплаву. Розв'язано систему аналітичних рівнянь для рівноважних значень введеного набору параметрів впорядкування в залежності від температури, концентрації, і міжатомної взаємодії компонент сплаву, що впорядковується. Використовуючи отриману залежність енергії впорядкування від відстані, для сплаву Ni0.89Cr0.11, розраховано значення набору параметрів близького порядку і показано, що внесок багаточасткових кореляцій в сплаві Ni0.89Cr0.11 незначний. Використовуючи набір параметрів парних кореляцій і параметр дальнього порядку, отримано

температурні залежності рівноважних значень параметра близького порядку на першій координаційній сфері одночасно з температурною залежністю параметра дальнього порядку. Теоретично показано, що в сплаві Ni0.89Cr0.11 можливо існування впорядкованої структури Ni2Cr до області температур нижче 700K. В дисертації застосовано результати розрахунків ефективної міжатомної взаємодії для оцінки енергетичних бар'єрів між структурами YBa2Cu3O6 і YBa2Cu3O7 , а також кубічною і гексагональною модифікаціями карбіду кремнію. Ефективна парна міжатомна взаємодія для кремнію, вуглецю та кисню розраховувалася з застосуванням нормозберігаючих псевдопотенціалів Башлета-Хамана-Шлютера.

2. The thesis is dedicated to development of the electronic theory of interatomic correlation below the order-disorder phase transition temperature. It is based on description of interatomic interaction that is the determinative factor of the ordering in alloys. The system of analytical equations for equilibrium values of the set of ordering parameters as a function of temperature, concentration, and interatomic interaction between components of alloy is solved. The dependency of ordering energy as a function of distance on the basis of combination of effective pair interactions between components is calculated for Ni0.89Cr0.11 alloy. The effective pair interaction is described by two components: ion attraction by interaction with free electrons, and coulomb interaction of ion frames. The effective pair interaction of crystalline metallic alloy is calculated by means of the pseudopotentials model. The near order parameters are calculated on the basis of the dependency of ordering energy as a function of distance in the ring approach, which is behind the Krivoglaz-Clapp-Moss approach. The contribution of many-particle correlations in Ni0.89Cr0.11 alloy is shown to be small. The temperature dependencies of equilibrium values of the near order parameter at the first coordination sphere and with temperature dependencies of equilibrium values of the long order parameter are obtained using the set of pair correlation parameters and long order parameter. The possible existence of the ordered structure Ni2Cr in Ni0.89Cr0.11 alloy below 700K is theoretically shown. The results of calculations of efficient interatomic interactions are applied for estimation of energy barriers between YBa2Cu3O6 and YBa2Cu3O7 structures, and between cubic and hexagonal modifications of silicon carbide. The effective pair interatomic interaction for silicon, carbon and oxygen was calculated with using the non-conserving Bashlet-Haman-Shuter pseudopotentials. The model of the oxygen ordering with estimation of contribution to free energyofentropy member is proposed for superconductive ceramics. The calculations of 3C and 2H energy modifications of the carbide silicon are carried out and suggestions about possible mechanism of the structure transformation are made.

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. Макара Володимир Арсенійович

2. Makara Volodymyr Arsenijovych

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. Покропивний Володимир Васильович

2. Покропивний Володимир Васильович

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. Тимошевський Андрій Миколайович

2. Тимошевський Андрій Миколайович

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Макара Володимир Арсенійович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Макара Володимир Арсенійович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.