Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Image not found or type unknow

Державний обліковий номер: 0417U002874

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-09-2017

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Безпальчук Володимир Миколайович

2. Bezpalchuk Volodymyr

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: 13-09-2017

Спеціальність за освітою: 8.080202

Місце роботи здобувача: Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

Код за ЄДРПОУ: 02125622

Місцезнаходження: 18031, м. Черкаси, бульвар Шевченка,81

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): К 41.053.07

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: Черкаський національний університет імені Богдана Хмельницького

Код за ЄДРПОУ: 02125622

Місцезнаходження: 18031, м. Черкаси, бульвар Шевченка,81

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. Мультимасштабне моделювання фазоутворення в бінарних наносистемах із ГЦК структурою

2. Multiscale simulation of phase formation in binary nanosystems with FCC structure

Реферат/анотація:

1. Мета - розробка комп'ютерних моделей для основних етапів мультимасштабного моделювання нанесення, дифузійної взаємодії та впорядкування нанорозмірних плівок, та демонстрація їх застосування на прикладі технологічно важливих систем Ni-Al і Fe-Pt. Об'єкт - нанорозмірні плівки в мультишарових фоліях для СВС реакцій та нанорозмірні біметалеві плівки для магнітного запису інформації. Предмет - кінетика нанесення, атомної міграції, та фазових перетворень у нанорозмірних плівках. Методи - класичний метод молекулярної динаміки, звичайний та спеціально розроблений стохастичний середньопольовий кінетичний метод, кінетичний метод Монте-Карло. Наукова новизна отриманих результатів: 1. У тонкоплівковій системі Ni-Al порядок фазоутворення при відпалі напилених плівок визначається температурою підкладки в процесі напилення, послідовністю напилення та орієнтацією підкладки. 2. Метод KMF та його модифікація SKMF вперше застосовані до вакансійного механізму дифузії із використанням наближення квазістаціонарності вакансійної підсистеми. Додавання шуму частот в кінетичні рівняння середнього поля дозволяє коректно

промоделювати фазові перетворення 1-роду в сплаві, що дозволяє передбачити і описати наступні нові явища: а) "квантова" коалесценція в 1D структурі на завершальній стадії спінодального розпаду в нанодротинці; б) розповсюдження фронту переорієнтації структури L10 із вільної поверхні в середину зразка; в) наявність порогового значення шуму, нижче якого розпад із виділенням упорядкованої фази у скінченному нанооб'ємі не відбувається. 3. Зменшення розмірів наночастинки суттєво зменшує величину параметру порядку в області упорядкування. 4. Вперше метод SKMF застосовано для одночасного визначення кінетики дифузії мічених атомів і впорядкування в структурах типу L12 і L10. Практичне значення отриманих результатів: 1.Отримані моделі і результати із впливу температури підкладки та її орієнтації на реакційну здатність отриманих мультишарів дозволяють оптимізувати технологію виготовлення мультишарових фолій для подальших застосувань з СВС реакціями. 2. Спрогнозована в роботі, переорієнтація порядку в при поверхневих шарах фази L10 може стати визначальним фактором в технології отримання та використання магнітних плівок запису інформації. 3. Розроблений у роботі спрощений метод SKMF може бути широко використаний у багатьох модельних розрахунках процесів реакції та фазових перетворень.

2. The thesis treats the development of multiscale computer models for deposition, diffusion interaction, ordering of nanofilms and their application to technologically important Ni-Al and Fe-Pt systems. The object of the study in nanoscalefilms inmulti-layerfoils for SHS reactions and nanoscale bimetallicfilms for magnetic recording of information. Methods of research: the classical method of molecular dynamics, the original and specially developed stochastic kinetic mean field method, the kinetic method of Monte Carlo. New results: 1. Phase formation in the Ni-Al thin-film system during annealing process of deposited films is determined by: a) substrate temperature during deposition, b) deposition sequence, c) orientation of the substrate. In particular, the cold deposition of Ni on Al substrate with further annealing process leads to the formation of the disordered (probably liquid) solution as the first stage reaction diffusion. Deposition on a hot substrate leads to the formation of ordered phase further becomes a barrier. 2. KMF method and its modification SKMF first applied to the vacancy diffusion mechanism with the steady-state approximation of the vacancy subsystem, which allows to significantly increase the time step of the calculation of the kinetics of diffusion processes. 3. Adding noise frequencies in the mean-field kinetic equations allow correctly simulate the first-order phase transitions in alloys. Considering noise allow the possibility to predict and describe these new phenomena: a) "Quantum" coalescence in the 1D structure at the final stage of spinodal decomposition in nanorod. b) Propagation of the front of the reorientation of the L10 structure from a free surface to the center of the sample. c)The presence of noise threshold below which decomposition with ordering in finite sample not happens. Within the application of the method to the simulation of the decomposition with ordering in supersaturated alloy with concentration 7/8. That was made possible by the adding of noise in the simulation. 4. Reducing the size of the nanoparticles significantly reduces the value of the local order parameter in the area of ordering. 5. SKMF method used for the first time for simultaneous determination of the tracer diffusion kinetics and ordering structures such as L12 and L10. In this modified method based on the obtained tracer concentration profiles diffusion coefficients for a range of temperatures were found. Also, it was introduced a local long-range order parameter. The practical significance of the results is the fact that the obtained model of the effect of substrate temperature and its orientation to the reactivity of multilayer can optimize the technology of manufacturing the nanolayer foils for further applications at SHS reactions. Predicted in the work process of the reorientation in the surface layers of the L10 structure can be a determining factor in the technology of magnetic recording media. Developed SKMF simplified method can be widely used in many numerical models of the reaction and phase transformation.

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. Гусак Андрій Михайлович
2. Gusak Andriy

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. Богатирьов Олександр Олегович
2. Bogatyrev Oleksander

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. Макагон Юрій Миколайович

2. Макагон Юрій Миколайович

Кваліфікація: д.т.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. Радченко Тарас Михайлович

2. Радченко Тарас Михайлович

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 Ків Арік Юхимович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Ків Арік Юхимович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.