Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0518U000146

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-06-2018

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Закаріан Дора Арамаісівна

2. Zakarian Dora Aramaisovna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 23-05-2018

Спеціальність за освітою: 104

Місце роботи здобувача: Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: 03680, м. Київ -142, вул. Кржижановського, 3

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 26.207.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Кржижановського, 3, 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 проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: 03680, м. Київ -142, вул. Кржижановського, 3

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 20.19, 20.19

Тема дисертації:

1. Першопринципні методи розрахунку фізичних характеристик тугоплавких бінарних евтектичних композитів.

2. First-principles methods for calculating the physical characteristics of refractory binaryeutectic composites.

Реферат/анотація:

1. Розроблена методика побудови термодинамічного потенціалу двокомпонентних композитів в рамках єдиної теорії (метод псевдопотенціалу) послужила основою для отримання нового уявлення вільної енергії (потенціалу Гельмгольца) у вигляді суми енергії взаємодії представницьких елементів компонент замість звичної внутрішньої енергії взаємодіючих атомів. Показано, що для визначення складу і температури в точці евтектики досить побудувати термодинамічний потенціал для системи в твердому стані. З умов екстремуму термодинамічного потенціалу отримана система рівнянь, розв'язок якого визначає склад і температуру плавлення композиту в точці евтектики. Дана оцінка концентрації і температури в точці евтектики для будь-якої двокомпонентної системи в залежності від розмірів композиту у вигляді універсальної аналітичної формули. Оцінена залежність повної енергії електрон-іонної системи композиту від розташування атомів по

лінії стикування границь двох компонент. Представлені теоретичні розробки нових методів, які дозволяють обчислити енергії взаємодії щільноупакованих атомних площин в матеріалах з ГЩУ гратками, а також для матеріалів з алмазоподібною структурою. Метод узагальнений для шаруватих матеріалів (діхалкогенідів при інтеркаляції воднем). Оцінено вплив розмірного фактора на фізичні характеристики як кристалів так і композитів, що мають нанорозмір. Побудовані (на основі методу псевдопотенціалу) моделі, що описують вплив масштабного фактора на енергії взаємодії атомних площин. Для дослідження температурної залежності фізичних властивостей бінарних евтектичних систем сконструйована модель «квазігармонійного наближення» на основі методу псевдопотенціалів. Аналітично отримані формули, що описують міжфазну взаємодію в бінарних композитах. За допомогою цих співвідношень представлені нові правила для обчислення фізико-механічних характеристик композитів, зокрема – «модифіковане правило сумішей». Нове правило відрізняється від загальноприйнятого підходу, в якому вважалося, що внесок кожної фази в величину властивості суміші визначається властивістю цієї фази і її концентрацією в суміші. Отримані точні оцінки впливу міжкомпонентної взаємодії на фізичні характеристики композитів (склад і температура плавлення в точці евтектики, модуль пружності, теоретична або гранична міцність). Досліджено фізико-механічні характеристики бінарних композитів з урахуванням міжкомпонентної (або міжфазної, при обмеженій розчинності компонент) взаємодії в залежності від температури.

2. For refractory materials was developed the method for calculating the elastic characteristics and theoretical strength for uniaxial deformations. A model is developed for assessing the strength of nanocrystals, depending on their size and shape. It is shown that in order to determine the composition and temperature at the eutectic point, it is sufficient to construct a thermodynamic potential for a system in the solid state, which has a maximum in concentration and a minimum in temperature. From the extreme point of the thermodynamic potential, a system of equations is obtained whose solution determines the composition and melting temperature of the system at the eutectic point. To study the temperature dependence of the physical properties of binary eutectic systems, a "quasi-harmonic approximation" model is constructed on the basis of the pseudopotential method. This model allows inclusion of nonharmonic effects associated with the thermal expansion of materials within the framework of the harmonic approximation. An approach is presented to solve the problem of taking into account the intercomponent interaction, as well as the temperature dependence of the physical characteristics. Taking into account the intercomponent interaction leads to an increase in the permissible degree of deformation of the refractory component, which ultimately contributes to an increase in the ultimate strength of the binary system. Based on the results of the computational experiment, the role of the intercomponent interaction in the formation of eutectic systems was studied.

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. Фірстов Сергій Олексійович

2. Firstov Sergey Alecseevich

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.13

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. Фірстов Сергій Олексійович

2. Firstov Sergey Alecseevich

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.13

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. Котречко Сергій Олексійович

2. Котречко Сергій Олексійович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.13

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. Котречко Сергій Олексійович

2. Котречко Сергій Олексійович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.13

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. Прилуцький Юрій Іванович

2. Прилуцький Юрій Іванович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02

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. Прилуцький Юрій Іванович

2. Прилуцький Юрій Іванович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02

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. Яновський Володимир Володимирович

2. Яновський Володимир Володимирович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02

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. Яновський Володимир Володимирович

2. Яновський Володимир Володимирович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02

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 Фірстов Сергій Олексійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Фірстов Сергій Олексійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.