

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0419U000808

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 25-03-2019

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Стаднік Віталій Євгенійович

2. Stadnik Vitalii Ye.

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** кандидат наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 02.00.01

**Назва наукової спеціальності:** Неорганічна хімія

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** Не застосовується

**Дата захисту:** 22-03-2019

**Спеціальність за освітою:** Хімія

**Місце роботи здобувача:** Національний університет "Львівська політехніка"

**Код за ЄДРПОУ:** 02071010

**Місцезнаходження:** вул. С. Бандери, 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, Україна

**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 61.051.03

**Повне найменування юридичної особи:** Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

**Код за ЄДРПОУ:** 02070832

**Місцезнаходження:** вул. Підгірна, 46, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88000, 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:** Національний університет "Львівська політехніка"

**Код за ЄДРПОУ:** 02071010

**Місцезнаходження:** вул. С. Бандери, 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 31.17.15

**Тема дисертації:**

1. Синтез, структура і властивості плівок меркурій сульфідів та меркурій селенідів і твердих розчинів на їхній основі
2. Synthesis, structure and properties of mercury sulfide and mercury selenide films and solid solutions on their base

**Реферат:**

1. Запропоновано обґрунтований вибір складу реакційних систем на основі розрахунку граничних умов утворення малорозчинних форм халькогенідів меркурію без домішок побічних продуктів з використанням чотирьох комплексоутворюючих реагентів для синтезу плівок HgS і шести комплексоутворюючих реагентів для синтезу плівок HgSe. За результатами аналізу іонних рівноваг у системах  $\text{Hg}^{2+}-\text{Lx}-(\text{NH}_2)_2\text{CS}$  та  $\text{Hg}^{2+}-\text{Lx}-\text{Na}_2\text{SeSO}_3$  запропоновано використання тіокарбаміду та натрій тіосульфату для синтезу плівок HgS і HgSe відповідно. Експериментально визначені значення енергії активації процесу синтезу плівок HgS і HgSe, а також проведено квантово-хімічне моделювання хімізму XO плівок HgS з  $(\text{NH}_2)_2\text{CS}$  та XO плівок HgSe з KI, KSCN та  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$  на основі запропонованої гіпотези про можливе формування проміжних реакційноздатних комплексів, що мають колоїдну природу та є структурними ланками в процесі синтезу

плівки халькогенідів меркурію за рахунок кооперативних і флуктуаційних явищ у розчині. Проведено порівняння процесів осадження плівок HgS і HgSe з різними комплексоутворюючими реагентами на основі розрахованих енергетичних діаграм стадій модельованого хімізму XO плівок методом PM6. Синтезовано й охарактеризовано плівки HgS та HgSe, плівкові тверді розчини HgS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub>, Cd<sub>x</sub>Hg<sub>1-x</sub>Se, тернарної сполуки Hg<sub>3</sub>I<sub>2</sub>Se<sub>2</sub> та структури із подвійних шарів ZnS/HgS, HgS/ZnS, ZnSe/HgS, HgSe/ZnS, HgS/CdS, HgSe/CdS. У складі структур HgS/ZnS та HgS/CdS встановлено наявність фази сполуки HgS кубічної модифікації, що є наслідком примусової орієнтації матеріалу плівки до матеріалу підкладки.

2. A reasonable choice of the reaction systems composition were carried out based on calculations of mercury chalcogenides low soluble forms formation without admixtures of by-products using four complexing agents for the synthesis of films HgS films and six complexing agents for the synthesis HgSe films. According to the results of the ion equilibrium analysis in the Hg<sup>2+</sup>-L<sub>x</sub>-(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>CS and Hg<sup>2+</sup>-L<sub>x</sub>-Na<sub>2</sub>SeSO<sub>3</sub> systems, the use of thiourea and sodium thiosulfate were proposed for the synthesis of HgS and HgSe films, respectively. Experimentally, the values of the activation energies of the HgS and HgSe films synthesis were determined, as well as quantum-chemical modeling of chemical bath deposition chemistry of the HgS films with (NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>CS and HgSe films with KI, KSCN and Na<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>3</sub> based on the proposed hypothesis about the possible formation of intermediate reactive complexes which have colloidal nature and were the structural links in the process of mercury chalcogenides films synthesis due to co-operative and fluctuation phenomena in the solution. The comparison of HgS and HgSe films deposition processes with different complexing agents were carried out based on the calculated energy diagrams of the simulated chemical bath deposition chemistry stages by PM6 method. The HgS and HgSe films, solid solutions HgS<sub>x</sub>Se<sub>1-x</sub>, Cd<sub>x</sub>Hg<sub>1-x</sub>Se, ternary compound Hg<sub>3</sub>I<sub>2</sub>Se<sub>2</sub> and the structures ZnS/HgS, HgS/ZnS, ZnSe/HgS, HgSe/ZnS, HgS/CdS, HgSe/CdS were synthesized and characterized. In the HgS/ZnS and HgS/CdS structures was set the presence of HgS compound of cubic modification, which was the result of the forced orientation of the film material to the substrate material.

**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 ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Шаповал Павло Йосифович

2. Shapoval Pavlo Yo.

**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

## **VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів**

### **Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Федорчук Анатолій Олександрович

2. Fedorchuk Anatolii O.

**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

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Кохан Олександр Павлович

2. Kokhan Oleksandr P.

**Кваліфікація:** к. 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

Барчій Ігор Євгенович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні

Барчій Ігор Євгенович

Відповідальний за підготовку  
облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності



Юрченко Т.А.