Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0821U100663

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-04-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Соломенко Анастасія Геннадіївна
2. Solomenko Anastasiia Gennadiivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 14-04-2021

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: Криворізька спеціалізована школа № 9 з поглибленим вивченням економіки, права та іноземних мов

Код за ЄДРПОУ: 26458848

Місцезнаходження: вул. Дніпровське шосе, 32, м. Кривий Ріг, Криворізький р-н., Дніпропетровська обл., 50048, 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): ДФ 41.051.007

Повне найменування юридичної особи: Одеський національний університет імені І. І. Мечникова

Код за ЄДРПОУ: 02071091

Місцезнаходження: вул. Дворянська, буд. 2, м. Одеса, Одеська обл., 65082, 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: Криворізький державний педагогічний університет

Код за ЄДРПОУ: 40787802

Місцезнаходження: проспект Гагаріна, буд. 54, м. Кривий Ріг, Криворізький р-н., Дніпропетровська обл., 50086, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.31

Тема дисертації:

1. Функціоналізація двовимірних напівпровідникових матеріалів

2. Functionalization of two-dimensional semiconductor materials

Реферат/анотація:

1. Дисертацію присвячено вивченню локальної хімічної, адсорбційної та механічної функціоналізації двовимірних структур на основі графену та чорного фосфорену. Дослідження виконані методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів. Двовимірні напівпровідникові матеріали являють собою найтонші напівпровідники, які володіють новими властивостями порівняно зі своїми об'ємними аналогами. Основними їх перевагами є товщина в один або декілька атомів, відсутність поверхнево обірваних зв'язків, чималі заборонені зони, висока рухливість носіїв, висока гнучкість та здатність штучного поєднання. Досі існують перешкоди, що заважають практичному застосуванню двовимірних напівпровідникових матеріалів, одна з них – продуктивність пристроїв, яка, насамперед, залежить від електронних властивостей матеріалів в їх основі. Поліпшення властивостей двовимірних матеріалів є важливим кроком для реалізації їх багатофункціональних застосувань. Отже, потребують визначення підходи до модифікації властивостей двовимірних матеріалів. З метою виявлення нових

факторів впливу на електронні та фотонні властивості двовимірних напівпровідникових матеріалів шляхом обчислювального експерименту з використанням авторського програмного коду були проведені такі дослідження: розраховано просторові розподіли густин валентних електронів, густини електронних станів, ширини заборонених зон, кулонівські потенціали уздовж обраних напрямків, значення зарядів у матеріалах в областях різного розміру, діелектричні матриці, макроскопічні відносні проникності та спектри поглинання. Встановлено, що поєднання нефункціоналізованих та функціоналізованих ділянок графена за наперед спланованим малюнком в одну структуру дає контрольовані зміни електронних властивостей. Констатовано перерозподілення електричного заряду у площині графеноподібних комбінованих структур C/CH та C/CF з утворенням областей різного знаку. Визначено, що процес фторизації як функціоналізаційний вплив спричиняє перерозподіл електричного заряду між окремими ділянками двовимірних комбінованих структур C/CFH з різною концентрацією атомів фтору. Показано, що при збільшенні ступеня фторизації двовимірна комбінована структура C/CFH як фотонний кристал послаблює проходження електромагнітної хвилі у напрямку збурення . Оцінено довжину хвилі піку в адсорбційному спектрі двовимірної комбінованої структури C/CH як фотонного кристалу при 0%-вій фторизації в напрямку , що відповідає області м'якого рентгена (0,82 нм). Подальший процес фторизації призводить до зміщення піків в область ультрафіолетового випромінювання. Встановлено, що дія статичного тиску на комбіновану структуру C/CH як фотонного кристалу призводить до перебудови електронної густини у напрямку ковалентних зв'язків C-H, що викликає зміну ширини електронної забороненої зони, анізотропію діелектричних властивостей при різних напрямках вектора електричного поля збурюючої електромагнітної хвилі та зсув піків у спектрі поглинання. Визначено, що деформація вигину як функціоналізаційний вплив призводить до збільшення різниці заряду у комбінованих вигнутих структурах C/CH, C/CF, C/CCl та до збільшення ширини забороненої зони порівняно з недеформованими. Зафіксовано, що функціоналізація моношару чорного фосфорена молекулами карбаміду призводить до перерозподілу електричного заряду та формування ділянок різного знаку. Виявлено немонотонний характер зміни ширини забороненої зони моношару чорного фосфорена залежно від адсорбційної відстанні молекул карбаміду, що впливає на його провідність, якою можна керувати контролюючи локалізацію адсорбованих молекул. Ключові слова: функціоналізація, двовимірні напівпровідникові матеріали, фотонний кристал, графен, чорний фосфорен, електронні властивості, фотонні властивості, функціонал електронної густини, псевдопотенціал із перших принципів.

2. The dissertation is devoted to the study of local chemical, adsorption and mechanical functionalization of two-dimensional structures based on graphene and black phosphorene. Methods of density functional theory and pseudopotential from the first principles have been used. Two-dimensional semiconducting materials represent the thinnest semiconductors, holding novel properties, such as the absence of surface dangling bonds, sizable band gaps, high flexibility, and ability of artificial assembly. However, there are still some obstacles prohibiting the practical applications of two-dimensional semiconducting materials, one of which is to improve the device performance. Improving the properties of two-dimensional materials is an important step in implementing their multifunctional applications. Therefore, to well understand the factors affecting the device performance is highly desired. In order to identify new factors influencing the electronic and photonic properties of two-dimensional semiconductor materials by computational experiment using the author's program code, the following investigations were performed: calculated the spatial distributions of valence electron densities, the densities of electron states, the band gap widths, the Coulomb potentials along selected directions, the charge values in materials in regions of different sizes, the dielectric matrices, the macroscopic permittivities and absorption spectra. It is established that the combination of non-functionalized and functionalized sections of graphene according to a pre-planned pattern in one structure gives controlled changes of electronic properties. The redistribution of electric charge in the plane of graphene-like combined C/CH and C/CF structures with the formation of regions of different sign is stated. It is determined that the fluorination process as a functionalization effect causes the redistribution of electric charge between separate sections of two-dimensional combined C/CFH structures with different concentrations of fluorine atoms. It is shown that as the degree of fluorination increases, the two-dimensional combined C/CFH structure as a photonic crystal weakens the passage of an

electromagnetic wave in the direction of perturbation. The peak wavelength in the adsorption spectrum of a two-dimensional combined C/CH structure as a photonic crystal at 0% fluorination in the direction corresponding to the soft X-ray region (0,82 nm) was estimated. Subsequent fluorination process leads to a shift of the peaks in the region of ultraviolet radiation. It is established that the effect of static pressure on the combined C/CH structure as a photonic crystal leads to the rearrangement of the electron density in the direction of covalent C-H bonds, which causes a change in the band gap, anisotropy of dielectric properties at different directions of the electric field of the perturbing electromagnetic wave and shift of peaks in the absorption spectrum. It is determined that the bend deformation as a functionalization effect leads to an increase in the charge difference in the combined curved C/CH, C/CF, C/CCl structures and to an increase of the band gap width compared to the undeformed ones. It is recorded that the functionalization of the black phosphorene monolayer by urea molecules leads to the redistribution of electric charge and the formation of areas of different sign. The nonmonotonic nature of the change in the band gap of the black phosphorene monolayer depending on the adsorption distance of urea molecules was revealed. This affects its conductivity, which can be changed by controlling the localization of the adsorbed molecules. Keywords: functionalization, two-dimensional semiconductor materials, photonic crystal, graphene, black phosphorene, electronic properties, photonic properties, electron density functional, pseudopotential from the first principles.

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. Балабай Руслана Михайлівна

2. Balabai Ruslana Mihailovna

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. Ків Арнольд Юхимович
2. Kiv Arnold Uhimovich

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. Татаренко Валентин Андрійович
2. Tatarenko Valentyn Andriyovich

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ніцук Юрій Андрійович
2. Nitsyk Uriy Andriyovich

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ваксман Юрій Федорович
2. Vaksman Uriy Fedorovich

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

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Сминтина Валентин Андрійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Сминтина Валентин Андрійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.