Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0412U005970

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 01-11-2012

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мерзликін Павло Володимирович
2. Merzlikin Pavel Vladimirovich

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: 06-10-2012

Спеціальність за освітою: 8.070101

Місце роботи здобувача: Криворізький педагогічний інститут Державного вищого навчального закладу "Криворізький національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 37664469

Місцезнаходження: 50027 Дніпропетровська область, м. Кривий Ріг, пр. Гагаріна, 54

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки, молоді та спорту 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: Криворізький педагогічний інститут Державного вищого навчального закладу "Криворізький національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 37664469

Місцезнаходження: 50027 Дніпропетровська область, м. Кривий Ріг, пр. Гагаріна, 54

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.05

Тема дисертації:

1. Функціональні твердотільні наноструктури
2. Functional Solid-State Nanostructures

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена визначенню особливостей електронної структури наноматеріалів, що мають функціональні призначення в наноелектроніці: нанорозмірних легованих і нелегованих плівок ZnO та кремнію, нанокластерів кремнію, вбудованих у матрицю SiO2, та ротаксанів. Основним методом дослідження обрано теоретичні розрахунки на основі формалізму функціоналу електронної густини, методу псевдопотенціалу, квантової молекулярної динаміки Кар-Парінелло, що відносяться до класу методів із перших принципів. Визначені найвірогідніші механізми, що приводять до стабілізації полярних поверхонь тонких плівок ZnO товщиною 4–7 А, а саме стабілізація за рахунок неоднорідного стискання шарів або за рахунок адсорбції водню. Установлено, що легування тонкої плівки ZnO товщиною 7 А атомами міді та срібла в концентрації 4 % або 12,5 % приводить до формування нових енергетичних рівнів в області зайнятих станів (валентній зоні та забороненій зоні), тоді як легування вуглецем в концентрації 4 % не викликає появи додаткових станів. Продемонстровано, що система наноплівок ZnO, розташованих на відстані ~5 А одна від

одної, виступає як електричне реле, що замикається електронною перемичкою у вакуумному проміжку між плівками при адсорбції полярних молекул газу. Спрогнозовано отримання періодично повторюваних областей зі збільшеним значенням електронної густини (дротів) в кремнієвій плівці товщиною ~5 А при періодичному нанесенні на поверхню плівки плоских органічних молекул з неоднорідним розподілом електронної густини. Теоретично визначено, що вбудований в SiO2 нанокристал кремнію спричиняє появу низькозаселених станів у валентній та забороненій зонах за рахунок виникнення позитивних іонів Si в матриці SiO2. Визначений потенціальний рельєф переходу двопозиційного ротаксану між стабільними положеннями.

2. The thesis is devoted to determination of electronic structure of nanomaterials which have functional applications in a nanoelectronics: the nanodimensional doped and not doped films of ZnO and silicon, the nanoclusters of the silicon which have been built in a matrix of SiO2, and rotaxanes. Theoretical calculations based on the formalism of electronic density functional, a method of pseudopotential, quantum molecular dynamics of Kar-Parinello which belong to the class of ab-initio methods are chosen as the main method of research. The most probable stabilization mechanisms of polar surfaces of thin ZnO films in thickness of 4–7 A, namely stabilization at the expense of non-uniform compression of layers or at the expense of hydrogen adsorption were determined. It was established that the doping of a thin ZnO film in thickness of 7 A by atoms of copper and silver in concentration of 4 % or 12,5 % leads to formation of new energy levels in the range of occupied states whereas the doping by carbon in concentration of 4 % doesn't cause emergence of additional states. It is shown that the system of nanofilms of ZnO which are located at distance ~5 A one from another, acts as the electric relay which becomes closed by electronic crossing point in a vacuum interval between films at adsorption of polar molecules of gas. It was predicted the receiving of periodically repeating areas with the increased value of electronic density in a silicon film in thickness of 5 A at periodic adsorbing on a film surface of flat organic molecules with non-uniform distribution of electronic density. It was theoretically determined that the nanocrystal of silicon built in SiO2 leads to emergence of low-populated states in the valence band and band gap at the expense of emergence of positive Si ions in SiO2 matrix. The potential relief of two-positional rotaxane transition between stable states was defined.

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 Mikhailovna

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. Пелещак Роман Михайлович
2. Пелещак Роман 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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Тюрін Олександр Валентинович
2. Тюрін Олександр Валентинович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.17

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 Арнольд Юхимович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Ків Арнольд Юхимович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.

