

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U003499

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 10-12-2024

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Науменко Марина Валеріївна

2. Maryna V. Naumenko

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: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Фізика

Дата захисту: 28-06-2023

Спеціальність за освітою: Фізика (інформатика)

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

### **III. Відомості про організацію, де відбувся захист**

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** PhD 1617

**Повне найменування юридичної особи:** Криворізький державний педагогічний університет

**Код за ЄДРПОУ:** 40787802

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

**Форма власності:** Державна

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

**Ідентифікатор ROR:**

### **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, Кривий Ріг, Криворізький р-н., 50086, Україна

**Форма власності:** Державна

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

**Ідентифікатор ROR:**

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:** Українська

**Коди тематичних рубрик:** 29.19

**Тема дисертації:**

1. Електронні властивості наноструктур на основі p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>
2. Electronic properties of nanostructures based on p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

**Реферат:**

1. Виконано теоретичні розрахунки з використанням функціоналу електронної густини, псевдопотенціалу із перших принципів, власного програмного коду щодо оцінювання електронних властивостей різних наноструктур на основі p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Визначено керувальні впливи товщини, типу вільної поверхні, механічної дії стиснення на провідні властивості надтонких плівок p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Встановлено, що плівка з поверхнею (010) товщиною 0,304 нм, яка трактувалася як 2D-об'єкт, у вихідному (нестисненому) стані має величину забороненої зони майже в п'ять разів більше, ніж у масивного кристалу p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Плівка з неплоскою поверхнею (100) товщиною 1,29 нм під час стиснення до 30 % має величину забороненої зони, що рівна нулеві. Під час стиснення надтонких плівок утворюються орієнтаційні дефекти хімічних зв'язків, що проявляються в різкій та немонотонній зміні ширин електронних заборонених зон. Досліджено сенсорну чутливість наночастинок p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> різних форм (сферичної та призмоподібної) до газових молекул CO, NH<sub>3</sub>, O<sub>3</sub>, що локалізувалися або поблизу атомів Ga чи O. Встановлено, що наночастинок обох форм можуть служити ефективними резистивними детекторами молекул CO і NH<sub>3</sub>. Більш яскрава реакція на молекули CO

була зафіксована у сферичної частинки, а щодо молекул NH<sub>3</sub> – у призмоподібної частинки. Проте активна ділянка наночастинок, як детекторів локалізувалася біля атомів Ga. На молекули O<sub>3</sub> ефективно реагували тільки сферичні наночастинок, збільшуючи свою провідність. Встановлено синергетичні властивості масивів нанодротів на основі p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> за допомогою визначення ступеня впливу дротів один на одного залежно від геометричних параметрів їх взаємного розташування в масиві й електронні характеристики масиву дротів як єдиного цілого. Масиви дротів p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> циліндричної форми і більшого діаметра виявляють більш контрольовані та фізично аргументовані синергетичні електронні характеристики, ніж масиви дротів циліндричної форми меншого діаметра та призмоподібної форми. Оцінено ефективність легування p-типу наноб'єктів на основі p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> різними металами та неметалами. Вказано перспективні домішки p-типу: атоми двовалентних металів – Mg, Ca, Zn, що заміщують атоми галію та атоми неметалу N, що заміщують різно позиційовані атоми кисню.

2. Theoretical calculations were performed using the electron density functional, the pseudopotential from first principles, and our own software code for evaluating the electronic properties of various nanostructures based on p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. The controlling effects of the thickness, the type of free surface, and the mechanical effect of compression on the conductive properties of p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> ultrathin films were determined. It was established that the film with the (010) surface 0.304 nm thick, which was interpreted as a 2D object, in its initial (uncompressed) state has a band gap almost five times larger than that of a massive p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> crystal. A film with a non-flat surface (100) 1.29 nm thick, when compressed to 30 %, has a band gap equal to zero. During the compression of ultrathin films, orientational defects of chemical bonds are formed, which are manifested in a sharp and non-monotonic change in the widths of the electronic band gaps. The sensory sensitivity of p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles of different shapes (spherical and prismatic) to CO, NH<sub>3</sub>, O<sub>3</sub> gas molecules near or near Ga or O atoms was studied. It was established that nanoparticles of both shapes can serve as effective resistive detectors of CO and NH<sub>3</sub> molecules. A brighter reaction to CO molecules is recorded in spherical particles, and a brighter reaction to the NH<sub>3</sub> molecules is recorded in a prism-like particle. At the same time, the active area of nanoparticles as detectors was localized near Ga atoms. Only spherical nanoparticles effectively reacted to O<sub>3</sub> molecules, increasing their conductivity. Synergistic properties of nanowire arrays based on p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> were established by determining the degree of influence of wires on each other depending on the geometric parameters of their mutual location in the array and electronic characteristics of the array of wires as a whole. Arrays of p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> wires of cylindrical shape and larger diameter reveal more controlled and physically justified synergistic electronic characteristics than arrays of cylindrical wires of smaller diameter and prismatic shape. The effectiveness of doping p-type nanoobjects based on p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> with various metals and nonmetals was evaluated. Promising p-type impurities were indicated: atoms of divalent metals – Mg, Ca, Zn, replacing gallium atoms and non-metal atoms N, replacing differently positioned oxygen atoms.

**Державний реєстраційний номер ДіР:**

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:** Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:** Не застосовується

**Підсумки дослідження:** Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

**Публікації:**

- Balabai R. Methodology of converting of the coordinates of the basis atoms in a unit cell of crystalline p-Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, specified in a monoclinic crystallographic system, in the laboratory cartesian coordinates for computer applications / Balabai R., Naumenko M.V. // Photoelectronics. – 2020. V. 29. P. 12-20

- Balabai R. Mechanical modification of electronic properties of ultrathin  $\pi$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> Films / Balabai R., Zdeschits V., Naumenko M. // Ukrainian Journal of Physics. – 2021. V. 66 (12). P. 1048
- Balabai R. Energy levels of acceptor impurities in  $\pi$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanostructures / Balabai R., Bondarenko O., Naumenko M. // Materialstoday: Proceedings. – 2022. V. 62. Part 9. P. 5838-5844
- Balabai R. Synergistic properties of  $\pi$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanowire arrays / Balabai R. M., Naumenko M. V. // Physics and Chemistry of Solid State. – 2023. V. 24, No. 1. P. 56-63
- Balabai R. Sensory sensitivity to the form of  $\pi$ -Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> nanoparticles / Balabai R., Naumenko M. // Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii. – 2022. V. 20 (3). P. 617-629

**Наукова (науково-технічна) продукція:** матеріали; аналітичні матеріали

**Соціально-економічна спрямованість:** підвищення продуктивності праці

**Охоронні документи на ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:** Впроваджено

**Зв'язок з науковими темами:** 0121U111337

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

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Балабай Руслана Михайлівна
2. Ruslana M. Balabai

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., доц., 01.04.07

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0002-2618-7796

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Криворізький державний педагогічний університет

**Код за ЄДРПОУ:** 40787802

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

**Форма власності:** Державна

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

**Ідентифікатор ROR:**

## VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Глушко Євген Якович
2. Yevhen Y. Glushko

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., професор, 01.04.07

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова  
Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05416952

**Місцезнаходження:** проспект Науки, буд. 41, Київ, 03028, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Маркович Богдан Михайлович

2. Bohdan M. Markovych

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., професор, 01.04.02

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Національний університет "Львівська політехніка"

**Код за ЄДРПОУ:** 02071010

**Місцезнаходження:** вул. Степана Бандери, буд. 12, Львів, 79013, Україна

**Форма власності:** Державна

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

**Ідентифікатор ROR:**

**Рецензенти****Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Возняк Андрій Васильович

2. Andrei V. Voznyak

**Кваліфікація:** к. ф.-м. н., доц., 05.17.06

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Криворізький державний педагогічний університет

**Код за ЄДРПОУ:** 40787802

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

**Форма власності:** Державна

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

**Ідентифікатор ROR:**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Білинський Ігор Васильович

2. Ihor V. Bilynskyi

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., професор, 01.04.10**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0002-4221-9225**Додаткова інформація:****Повне найменування юридичної особи:** Криворізький державний педагогічний університет**Код за ЄДРПОУ:** 40787802**Місцезнаходження:** проспект Гагаріна, буд. 54, Кривий Ріг, Криворізький р-н., 50086, Україна**Форма власності:** Державна**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України**Ідентифікатор ROR:****VIII. Заключні відомості****Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
голови ради**

Соловйов Володимир Миколайович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні**

Соловйов Володимир Миколайович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

Данченко Тетяна Сергіївна

**Реєстратор**

УкрІНТЕІ

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності**

Юрченко Тетяна Анатоліївна