

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0821U102039

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-07-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Терещук Володимир Валерійович

2. Tereshchuk Volodymyr

Кваліфікація: д.філософ, 104

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: 29-06-2021

Спеціальність за освітою: 104 Фізика та астрономія

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): ДФ 26.002.048

Повне найменування юридичної особи: Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

Код за ЄДРПОУ: 02070921

Місцезнаходження: проспект Перемоги, буд. 37, м. Київ, 03056, 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 технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

Код за ЄДРПОУ: 02070921

Місцезнаходження: проспект Перемоги, буд. 37, м. Київ, 03056, 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

Тема дисертації:

1. Динаміка формування впорядкованих квазі-одновимірних твердотільних наносистем
2. Dynamics of formation of ordered quasi-one-dimensional solid-state nanosystems

Реферат:

1. Формування квазіодновимірних структур базується на використанні наностержнів в якості базових елементів. Дана дисертаційна робота присвячена дослідженню двох варіантів еволюції їх морфології. В першому з них поперечний переріз наностержня стає періодично промодульованим в результаті спонтанної трансформації поверхні в предплавильному режимі (температура нанодропу набагато нижча температури плавлення матеріалу з якого він був синтезований). На заключній стадії такі модуляції приводять до розпаду нанодропу на ланцюжок ізомерних нанокрапель. За умови забезпечення належного контролю над кінетикою процесу ефект термічної нестійкості наностержнів може використовуватися для створення хвильоводів субхвильової оптики. В другому варіанті базовий нанодріт використовується як квазіодновимірна підкладка для подальшого синтезу на ній впорядкованої системи нанокластерів, тобто створення наностержнів типу ядро-оболонка. Однорідні за діаметром нанодропи значно поступаються системам ядро-оболонка в

спроможності «захоплювати» світло розрахованою на одиницю маси. Тому визначення методів керування геометричними параметрами наностержнів типу ядро-оболонка дозволить різко зменшити масу «дзеркала»-детектора в оптичному резонаторі з подальшими можливостями детектувати механічні рухи досліджуваних об'єктів впритул до квантових ефектів. Основна частина дисертаційної роботи складається з чотирьох розділів, які присвячені: (i) встановленню фізичних механізмів, що відповідальні за спонтанну періодичну модуляцію поверхні і подальший розпад наностержня; (ii) визначенню закономірностей формування нанокластерів на нанодроті в режимі синтезу; (iii) розробці методів контролю параметрів як процесу розпаду, так і процесів синтезу для формування систем з наперед заданою морфологією та фізичними властивостями. Перший розділ даної дисертаційної роботи присвячено детальному аналізу процесів розпаду циліндричних наностержнів з гранецентрованою кубічною кристалічною ґраткою в залежності від температури системи. В цьому ж розділі представлено опис моделі Монте-Карло на базі якої проводились дослідження. На основі проведених чисельних експериментів було встановлено, що прояв анізотропії густини поверхневої енергії може суттєво впливати на кінетику процесу розпаду та в ряді випадків спричиняти значні відхилення значень довжини хвилі модуляцій поперечного перерізу з максимальним інкрементом росту від передбачень існуючих моделей. У зв'язку з цим було побудовано аналітичну модель, на основі якої отримано вираз де враховується залежність довжини хвилі модуляцій радіусу нанодроту від анізотропії густини поверхневої енергії, що дозволив з високою точністю передбачити значення довжини хвилі модуляцій поверхні для наностержнів різних орієнтацій. У другому розділі кінетичний метод Монте-Карло було застосовано для вивчення фізичних механізмів, що відповідають за розпад нанодротів із кубічною кристалічною структурою типу алмаза на ланцюжки наночастинок. Залежно від температури та орієнтації осі нанодроту відносно його внутрішньої кристалічної структури, довжини хвиль модуляцій поперечного перерізу перевищують його початковий радіус у 4-18 разів. Показано, що причиною формування модуляцій поверхні наностержнів з ультра-короткими довжинами хвиль $4.5 < \lambda < 2 \lambda$ є ефект roughening transition, що в залежності від температури системи може проявлятися на окремих або усіх гранях, які формують бічну поверхню наноструктури. У третьому розділі досліджуються особливості кінетики нанодротів з кубічною об'ємноцентрованою кристалічною ґраткою на різних стадіях їх розпаду та проаналізовано залежність довжини хвилі поверхневих збурень наностержнів з ГЦК та ОЦК кристалічними ґратками від зовнішнього впливу, що призводить до інтенсифікації поверхневої дифузії на наностержнях. На базі кінетичної моделі Монте-Карло визначено, що для певних орієнтацій наностержнів з ОЦК ґраткою ефект roughening transition грає основну роль в процесі розпаду та є причиною утворення терас на їх боковій поверхні та розвитку короткохвильових збурень поперечного перерізу. В четвертому розділі проаналізовано фізичні механізми, відповідальні за формування впорядкованої послідовності нанокластерів, синтезованих на нанодротах з алмазоподібною кристалічною ґраткою в дифузійному режимі осадження вільних атомів. Встановлено, що основними факторами, що визначають самовпорядкування системи нанокластерів є поверхнева дифузія атомів та ефект тіні, за рахунок якого густина дифузійного потоку атомів в міжкластерну область суттєво падає на кінцевих стадіях синтезу чим заважає утворенню нанокластерів другого покоління. На основі отриманих результатів визначено, що зміна швидкості постачання атомів в систему є дієвим методом забезпечення високого рівня періодичності у розташуванні нанокластерів вздовж базового нанодроту та дає можливість синтезувати наноструктури з бажаними геометричними параметрами.

2. The formation of quasi-one-dimensional structures is based on the use of nanowires as basic elements. This dissertation is devoted to the study of two variants of the evolution of their morphology. In the first one, the cross-section of the nanowire becomes periodically modulated as a result of spontaneous transformation of the surface in the pre-melting mode (the temperature of the nanowire is much lower than the melting point of the material from which it was synthesized). In the final stage, such modulations lead to the break-up of the nanowire into a chain of isomeric nanodroplets. Provided proper control over the kinetics of the process, the effect of thermal instability of nanorods can be used to create waveguides of subwavelength optics. In the second case, the base nanowire is used as a quasi-one-dimensional substrate for further synthesis of an ordered system of nanoclusters - i.e. the creation of the core-shell nanowires. Homogeneous in diameter nanowires are significantly inferior to

core-shell systems in the ability to "capture" light per unit mass. Therefore, the establishment of methods for controlling the geometric parameters of core-shell nanowires will dramatically reduce the mass of the "mirror" - detector in the optical resonator with the subsequent ability to detect mechanical motions of the studied objects up to quantum effects. The main part of the dissertation consists of four sections, which are devoted to: (i) the establishment of physical mechanisms responsible for spontaneous periodic modulation of the surface and the subsequent break-up of the nanorod; (ii) determining the patterns of formation of nanoclusters on the nanowire in the synthesis mode; (iii) development of methods for controlling the parameters of both the disintegration and the synthesis processes for the formation of systems with predetermined morphology and physical properties. The first section of this dissertation is devoted to a detailed analysis of the break-up processes of cylindrical nanowires with a face-centered cubic crystal lattice depending on the system temperature. The same section presents a description of the Monte Carlo model on the basis of which the research was conducted. Based on numerical experiments, it was found that the manifestation of the anisotropy of surface energy density can significantly affect the kinetics of the break-up process and in some cases cause large deviations of the cross-sectional modulation wavelengths with maximum growth increment from the predictions of existing models. In this regard, an analytical model was built, based on which an expression was obtained which takes into account the dependence of the wavelength of modulations of the nanowire radius on the anisotropy of surface energy density, which allowed to predict with high accuracy the wavelength of surface modulations for nanowires of different orientations. In the second section, the Monte Carlo kinetic method was used to study the physical mechanisms responsible for the disintegration of nanowires with a diamond-like cubic crystal structure into chains of nanoparticles. Depending on the temperature and orientation of the nanowire relative to its internal crystal structure, the wavelengths of modulations of the cross-section exceed its initial radius by 4-18 times. It is shown that the reason for the formation of surface modulations of nanowires with ultra-short wavelengths $4.5 < \lambda < 2\pi$ is the effect of roughening transition, which depending on the system temperature may appear on some or all faces that form the lateral surface of the nanostructure. The third section investigates the kinetics of nanowires with a cubic body-centered crystal lattice at different stages of their break-up and analyzes the dependence of the wavelength of surface perturbations of nanorods with FCC and BCC crystal lattices on external influences, which lead to surface diffusion intensification. It was determined that for certain orientations of nanowires with BCC lattice the roughening transition effect plays a major role in the disintegration process and causes the formation of terraces on their lateral surface and the development of short-wave perturbations of the cross-section. The fourth section analyzes the physical mechanisms responsible for the formation of an ordered sequence of nanoclusters synthesized on nanowires with a diamond-like crystal lattice. It was established that the main factors determining the self-ordering of the nanocluster system are the surface diffusion of atoms and the shadow effect. Based on the obtained results, it was determined that changing the rate of supply of atoms to the system is an effective method of ensuring a high level of periodicity in the location of the nanoclusters along the base nanowire and allows to synthesize nanostructures with desired geometric parameters.

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. Горшков В'ячеслав Миколайович
2. Gorshkov Vyacheslav M.

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. Бекєньов Лев Валерійович
2. Bekenov Lev V.

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Войтенко Олександр Іванович

2. Voitenko Oleksandr I.

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. Калита Віктор Михайлович

2. Kalita Viktor M

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. Горобець Оксана Юріївна

2. Gorobets Oksana Y.

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

VIII. **Заключні відомості**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради**

Зауличний Ярослав Васильович

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

Зауличний Ярослав Васильович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Реєстратор

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



Юрченко Т.А.