

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0412U003553

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 07-06-2012

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Тарасова Олена Юріївна

2. Tarasova Olena Yuriivna

**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:** 18-05-2012

**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):** Д 08.051.02

**Повне найменування юридичної особи:** Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара

**Код за ЄДРПОУ:** 02066747

**Місцезнаходження:** проспект Гагаріна, 72, м. Дніпро, Дніпропетровський р-н., Дніпропетровська обл., 49010, 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 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

**Тема дисертації:**

1. Локальна будова нанорозмірних гетеро- та пористих структур на основі кремнію
2. Local structure of silicon porous and nanosizing heterosructures

**Реферат:**

1. Об'єкт дослідження: еволюція локальної будови нанорозмірних систем на основі кремнію під час їх створення та використання. Мета роботи: визначення особливостей атомної будови нанорозмірних гетеросистем Si/Si-OY-Si4-Y, Si/Si3N4 та пористого кремнію. Методи: комп'ютерне моделювання багатоатомних структур із використанням атомних потенціалів за алгоритмом Монте-Карло та методами функціоналу електронної густини і псевдопотенціалу із перших принципів. З'ясовані деталі атомної будови і термодинамічні характеристики тонких гетеросистем Si/Si-OY-Si4-Y, Si/Si3N4, а також пористого кремнію. На підставі комп'ютерного моделювання у надтонкій системі Si/Si-Oy-Si4-у визначена гранична концентрація кисню, при якій формується неперервний преципітат кремнію, що пронизує оксид кремнію. За допомогою обчислювального експерименту підтверджено, що границя розділу Si(111)/Si3N4(0001) може бути

різкою, вільною від дефектів, але механічно напруженою. Зафіксована анізотропія електронних властивостей атомів уздовж поверхні дроту пористого кремнію. Комп'ютерними розрахунками досліджено зміни атомної будови пористого кремнію з підвищенням температури і у атмосфері кисню – для різних температур зафіксовані функції радіального розподілу та визначені деякі температури, що цікаві з точки зору використання та виготовлення пористого кремнію. Ультра тонкі оксиди та нітриди на кремнії – матеріали, які найчастіше використовуються в якості підзатворного діелектрика в приладах з надвисоким ступенем інтеграції. Для них отримані товщини шарів та концентрації складових, що забезпечують їх якість. Степінь упровадження: рекомендації та застереження технологам при виготовленні приладів з надвисоким ступенем інтеграції. Сфера використання: гетероструктури та пористі матеріали. Виготовлення гетероструктур нанорозмірних оксидів та нітридів кремнію на кремнії та пористого кремнію.

2. Object of research: the evolution of the local structure of nanoscale silicon-based systems during their development and use. Objective: To determine the atomic structure of nanoscale features heterosystems Si/Si-OY-Si4-Y, Si/Si3N4 and porous silicon. Methods: A computer simulation of polyatomic structures using atomic potentials according to the algorithm of Monte Carlo methods and density functional theory and pseudopotential from first principles. Details of a nuclear structure and thermodynamic characteristics of thin heterosystems Si/Si-OY-Si4-Y, Si/Si3N4, and also porous silicon are found out. Based on computer modeling in the system of hyperfine Si/Si-OY-Si4-Y definite limiting oxygen concentration at which the precipitate formed by a continuous silicon. With the help of computer simulation confirmed that the interface Si(111)/Si3N4 (0001) may be sharp, free of defects. Fixed anisotropy of the electronic properties of atoms along the surface of the wires of porous silicon. Computer calculations to study changes in the atomic structure of porous silicon with increasing temperature in an oxygen atmosphere - for different temperatures recorded radial distribution functions, and some definite temperature, which are interesting from the point of view of the use and manufacture of porous silicon. Ultra thin oxides and nitrides on silicon materials that are most often used as a gate insulator in devices with ultra-high degree of integration. For them, calculated as the thickness of layers and concentration of components that provide their quality. Degree of implementation: tips and warnings technologists in the manufacture of devices with ultra-high degree of integration. Field of use: the heterostructures and porous materials. Fabrication of nanoscale heterostructures silicon oxides and nitrides on silicon and porous silicon.

**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. 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. Глушко Євген Якович

2. Глушко Євген Якович

**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. Башев Валерій Федорович

2. Башев Валерій Федорович

**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**

## **VIII. Заключні відомості**

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

Скалозуб Володимир Васильович

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

Скалозуб Володимир Васильович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.