Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0415U004303

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-07-2015

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Вакульчак Василь Васильович
2. Vakulchak Vasyl Vasyliovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.10

Назва наукової спеціальності: Фізика напівпровідників і діелектриків

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 03-07-2015

Спеціальність за освітою: 7.05080102

Місце роботи здобувача: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: 88000 Закарпатська обл., м.Ужгород вул.Підгірна.46

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): Д 61.051.01

Повне найменування юридичної особи: ДВНЗ "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження: пл. Народна, 3, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88000, 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: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: 88000 Закарпатська обл., м.Ужгород вул.Підгірна.46

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. Електронна структура дихалькогенідів кремнію і германію та суперіоніків M2Si(Ge)S3 (M = Li, Na, Ag)
2. The electronic structure of silicon and germanium dichalcogenides and superionics M2Si(Ge)S3 (M = Li, Na, Ag)

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню із перших принципів електронної структури, хімічного зв'язку і оптичних властивостей різних поліморфних форм дихалькогенідів кремнію і германію, сесквітелуриду кремнію та суперіоніків типу MI2AIVS3 (M = Li, Na, Ag; AIV = Si, Ge). Проведено порівняльний аналіз впливу ізокатіонного й ізоаніоннонго заміщення в кристалах AIVBVI2 на електронну структуру даних сполук. Встановлено, що аніонне S-Se та катіонне Si-Ge заміщення в бінарних сполуках AIVBVI2 приводить до зменшення загальної ширини валентної зони і ширини забороненої щілини. Особливістю електронного спектра у валентній зоні бінарних AIVBVI2 і потрійних MI2AIVS3 сполук є наявність трьох відокремлених підзон сформованих гібридизацією s- і p-станів аніона й катіона. Проведено комплексне дослідження електропровідності, спектрів крайового поглинання і фотопровідності шаруватих кристалів Si2Te3 в широкому інтервалі температур. Виявлено урбахівську форму краю поглинання в кристалічному Si2Te3, обумовлену сильною електрон-фононною взаємодією. Із аналізу кристалічної структури та просторового

розподілу густини електронного заряду слідує, що в суперіоніках Li2SiS3 і Na2GeS3 в ковалентно зв'язаному каркасі із тетраедрів [SiS4] та [GeS4] наявні "тунелі" з мінімальною електронною густиною, які служать каналами для переміщення іонів лужних металів, чим і зумовлена їх висока іонна провідність.

2. The thesis is devoted to the investigation from the first principles the electronic structure, the chemical bond and optical properties of different polymorphic phases of silicon and germanium dichalcogenides, silicon telluride Si2Te3 and superionics of MI2AIVS3 (M = Li, Na, Ag; AIV = Si, Ge) type. The comparative analysis of the influence of isocationic and isoanionic substitution in AIVBVI2 crystals on the electronic structure of the present compounds was carried out. It is established that anionic S-Se and cationic Si-Ge substitution in AIVBVI2 binary compounds leads to a decrease of the total width of the valence band and the band gap. The feature of electronic spectrum in the valence band of binary AIVBVI2 and ternary MI2AIVS3 compounds is the presence of three separated subbands formed by hybridization of s - and p- states of anion and cation. A comprehensive study of the electrical conductivity, absorption edge and photoconductivity spectra of Si2Te3 layered crystals was performed in a wide temperature range. It was revealed that the Urbach form of the absorption edge in crystalline Si2Te3 due to a strong electron-phonon interaction. From the analysis of the crystal structure and a spatial distribution of the electron charge density it follows that in Li2SiS3 and Na2GeS3 superionics in covalently bound skeleton of [SiS4] and [GeS4] tetrahedra there are "tunnels" with minimal electron density, which serve as channels for moving of alkali metals ions, and this is caused their high ionic conductivity.

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. Блецкан Дмитро Іванович

2. Bletskan Dmytro Ivanovych

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Маслюк Володимир Трохимович

2. Маслюк Володимир Трохимович

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. Товстюк Корнелія Корніївна

2. Товстюк Корнелія Корніївна

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

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Блецкан Дмитро Іванович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Блецкан Дмитро Іванович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.