Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0821U102936

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-12-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Клиско Юрій Володимирович

2. Klysko Yuriy V

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 153

Назва наукової спеціальності: Автоматизація та приладобудування. Мікро- та наносистемна техніка

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 16-12-2021

Спеціальність за освітою: 8.05080102 “Фізична та біомедична електроніка”

Місце роботи здобувача: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, Україна

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): ДФ 35.052.085

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, 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 університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071010

Місцезнаходження: вул. Степана Бандери, буд. 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 47.09

Тема дисертації:

1. Електронні, оптичні та магнітні властивості металорганічних комплексів як перспективних матеріалів наноелектроніки та наноспінтроніки

2. Electronic, optical and magnetic properties of metal-organic frameworks as promising materials of nanoelectronics and nanospintronics

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена вивченню електронної структури металорганічних комплексів, їх оптичних та магнітних властивостей з метою отримання характеристик, що можуть бути використані при розробленні елементів наноелектроніки та спінотроніки на базі даних матеріалів. В першому розділі дисертації описано квантово-механічні методи дослідження електронних, оптичних та магнітних властивостей матеріалів. Проаналізовано одностаничникові підходи, наближення обмінно-кореляційного функціоналу, а також гібридні функціонали. Описані фізичні основи та математичний апарат даних методів, а також вказані на переваги та недоліки кожного з підходів. Проведено аналіз квазічастинкових методів, що базуються на використанні функції Гріна - метод GWA та рівняння Бете-Солпітера. В даному розділі також описано методи дослідження магнітних властивостей, а саме, розрахунок основного стану спінполяризованих систем та модель Гейзенберга. Описано особливості реалізації методів та апроксимації у програмному

пакеті ABINIT. Другий розділ містить чотири підрозділи, що присвячені дослідженню чотирьох груп металорганічних сполук - фталоціаніни перехідних металів, двовимірні структури на основі гексаамінобензену та гексаамінтрифенилену нікелю та міді, координаційних полімерів на основі піразиндитіолату міді та нікелю, металорганічного комплексу MOF-74. В кожному підрозділі подано короткий літературний огляд характеристик металорганічних комплексів та їх дослідження в якості матеріалів електроніки. Вказано методи та послідовність проведення розрахунків, вхідні параметри, що визначають точність розрахунку.Досліджено магнітні властивості фталоціанінів перехідних металів. Отримано електронну енергетичну структуру та діелектричну функцію з урахуванням поведінки сильноскорельованих d-електронів та екситонних ефектів. Для фталоціанінів марганцю, заліза та кобальту електроні та оптичні властивості отримано для пара- та феромагнітного станів. Розраховано та проаналізовано електронний енергетичний спектр та парціальну густину станів у двовимірних металорганічних наноструктурах на основі гексаамінобензену та гексамінотрифенилену нікелю та міді. Подано електронні властивості пористих комплексів на основі піразиндитіолату міді та нікелю. Проаналізовано вплив сильноскорельованих d-електронів перехідних елементів. Визначено, що дані сполуки є виродженими напівпровідниками p-типу. Приведено частотні залежності дійсної та уявної частини діелектричної функції. Проведено аналіз пара-, феро- та антиферомагнітних магнітних станів у металорганічному комплексі MOF-74 із вмістом марганцю, заліза, кобальту та нікелю. Отримано температурні залежності намагніченості та магнітної сприйнятливості. Для даних магнітних станів проведено розрахунок електронного енергетичного спектру з урахуваннях сильних кореляції d-електронів. Отримані частотні залежності дійсної та уявної частини діелектричної функції.

2. The dissertation is devoted to the investigation of the electronic structure of metal-organic frameworks, their optical and magnetic properties in order to obtain characteristics that can be used in the development of elements of nanoelectronics and spinotronics. In the first section of the thesis ab initio quantum methods of evaluating electronic, optical and magnetic properties of materials are described. Single-particle approximations of the exchange-correlation potential are presented. Physical and mathematical feature of these methods are described, as well as the advantages and disadvantages of each of the approaches are indicated. The analysis of the Green's function based quasiparticle methods (the GWA method and the Bethe-Salpeter equation) is performed. This section also describes methods of studying of magnetic properties - ground-state calculations of spin polarized systems and the Heisenberg model. The implementation features of these methods and approximations in the ABINIT code are presented. The second section contains four subsections devoted to the electronic structure investigation of metal-organic nano-objects, namely transition metal phthalocyanines,hexaminobenzene- and hexaamintriphenylene-based two-dimensional complexes, pyrazinedithiolate-based coordination polymers, metal-organic framework MOF-74. A brief literature review of materials properties and their application in electronics is presented in each subsection. The features of calculations (methods and approximations , input parameters) are described. Magnetic properties of transition metal phthalocyanines have been studied. The electronic energy structure and the imaginary part of the dielectric function are obtained taking into account strongly correlated d-electrons and exciton effects. Electronic and optical properties of para- and ferromagnetic manganese, iron and cobalt phthalocyanines are obtained.The electronic energy spectrum and partial density of states in hexaaminobenzene- and hexaminetriphenylene-based two-dimensional metal-organic ano-objects are calculated. The electronic properties of pyrazinedithiolate-based coordination polymers are presented. The impact of strongly correlated d-electrons of transition elements is taken into account. These compounds were determined to be degenerate p-type semiconductors. The frequency dependence of the real and imaginary part of the dielectric function is calculated. The study of para-, ferro- and antiferromagnetic states in the transition metal containing metal -organic framework MOF-74 has been performed. Temperature dependences of magnetization and magnetic susceptibility are obtained. The electronic energy spectrum was calculated, taking into account the strong correlations of d-electrons, for each magnetic state. The frequency dependences of the real and imaginary part of the dielectric function are obtained.

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. Сиротюк Степан Васильович
2. Syrotyuk Stepan Vasilyovich

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. Ціж Богдан Романович
2. Tsizh Bohdan Romanovych

Кваліфікація: д.т.н., 05.27.06

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. Лучечко Андрій Петрович

2. Luchechko Andriy Petrovych

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Лукіянець Богдан Антонович

2. Lukiianets Bohdan Antonovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

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. Стахіра Павло Йосипович

2. Stakhira Pavel Yo.

Кваліфікація: д. т. н., 05.27.06

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 Фітьо Володимир Михайлович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Фітьо Володимир Михайлович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.