# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0825U002472

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 24-06-2025

**Статус:** Запланована

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**

## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Задорожній Віталій Миколайович
2. Vitalii M. Zadorozhnii

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCHID ID:** 0000-0002-1003-930X

**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:**

**Спеціальність за освітою:** Педагогіка і методика середньої освіти. Фізика та основи інформатики

**Місце роботи здобувача:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Сектор науки:** Не застосовується

## III. Відомості про організацію, де відбувся захист

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** PhD 9582

**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:**

**Сектор науки:** Університетський

## 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:**

**Сектор науки:** Університетський

## V. Відомості про дисертацію

**Мова дисертації:** Українська

**Коди тематичних рубрик:** 29.19

### Тема дисертації:

1. Зміщення зарядів у п’єзоелектричних матеріалах, механічно деформованих зовнішньою силою
2. Charge displacement in piezoelectric materials mechanically deformed by an external force

### Реферат:

1. Метою дослідження є встановлення кореляції між атомною будовою різних матеріалів та їх п’єзоелектричними властивостями, що дозволить ефективний відбір п’єзоелектричних матеріалів та типів механічних впливів на них. Об’єкт дослідження: п’єзоелектричні матеріали. Предмет дослідження: п’єзоелектричні властивості двовимірних напівпровідників на основі монохалькогенідів IV групи (GeS, GeSe), наноструктур на основі HfO2, полімерів L-молочної кислоти та нейлону-11 □-фази. Методи дослідження. Авторський комплекс комп’ютерних програм, що реалізує молекулярну динаміку за схемою Кар-Паррінелло з квантово-механічним розрахунком сил з використанням методу функціоналу електронної густини і псевдопотенціалу із перших принципів, що дозволяє отримувати достовірні дані за прийнятний час та з прийнятними обчислювальними затратами, має розвинені функціональні можливості відтворення й

редагування нанооб'єктів, обчислення електронно-структурних характеристик, їх аналізу та візуалізації, отже, реалізує багатомасштабне моделювання. Наукова новизна одержаних результатів. У роботі: - отримані нові дані перерозподілу валентних електронів у плівках монохалькогенідів IV групи з парною кількістю моношарів (центросиметричних) і з непарною кількістю (нецентросиметричних) при механічній дії. - вперше виконана оцінка інтенсивності п'єзоефекту у наноструктурах у залежності від їх форми. Так, у наноплівках на основі HfO2 спостерігався перерозподіл валентних електронів, що призводив до п'єзоелектричних ефектів, тоді як у нанокластерах HfO2 розподіл електронних зарядів залишався рівномірним як у механічно напруженому так і ненапруженому стані, тобто п'єзоефект не спостерігався; - набуло розвитку розуміння, що лише один фрагмент полімерного ланцюга (L-молочної кислоти) типу □ виявляє зарядову поляризацію підсистем валентних електронів та іонних остовів при механічних деформаціях, а саме, заряд відступає від звисаючих кінців полімерного фрагмента і втягується в його середину; - вперше визначено, що вплив згинання та стиснення уздовж вуглецевого скелету полімерного волокна (L-молочної кислоти) типу □ індукує у волокні більший поляризаційний потенціал ніж скручування; - набуло подальшого розвитку оцінювання поляризаційного перерозподілу заряду валентних електронів кристалічного полімеру нейлону-11 □ фази, котрий призводить до п'єзоелектричних ефектів. Підтверджено, що заряд зосереджено в області міжланцюгової взаємодії, яка не руйнується слабкими деформаціями полімера.

2. The aim of the research is to establish a correlation between the atomic structure of various materials and their piezoelectric properties, which will allow for the effective selection of piezoelectric materials and types of mechanical effects on them. Object of research: piezoelectric materials. Subject of research: piezoelectric properties of two-dimensional semiconductors based on group IV monochalcogenides (GeS, GeSe), nanostructures based on HfO2, polymers of L-lactic acid and nylon-11 □-phase. Research methods. The author's complex of computer programs, which implements molecular dynamics according to the Car-Parrinello scheme with quantum-mechanical calculation of forces using the method of the electron density functional and pseudopotential from first principles, which allows obtaining reliable data in an acceptable time and with acceptable computational costs, has developed functional capabilities for reproducing and editing nanoobjects, calculating electronic-structural characteristics, their analysis and visualization, therefore, implements multi-scale modeling. Scientific novelty of the obtained results. In the work: - new data on the redistribution of valence electrons in films of monochalcogenides of group IV with an even number of monolayers (centrosymmetric) and with an odd number (non-centrosymmetric) under mechanical action were obtained. - for the first time, an assessment of the intensity of the piezoelectric effect in nanostructures depending on their shape was performed. Thus, in nanofilms based on HfO2, a redistribution of valence electrons was observed, which led to piezoelectric effects, while in nanoclusters of HfO2, the distribution of electronic charges remained uniform both in the mechanically stressed and unstressed state, i.e., the piezoelectric effect was not observed; - it was understood that only one fragment of the polymer chain (L-lactic acid) of type □ exhibits charge polarization of the subsystems of valence electrons and ionic skeletons during mechanical deformations, namely, the charge retreats from the dangling ends of the polymer fragment and is drawn into its middle; - it was determined for the first time that the effect of bending and compression along the carbon skeleton of a polymer fiber (L-lactic acid) of type □ induces a greater polarization potential in the fiber than twisting; - further development of the evaluation of the polarization redistribution of the charge of valence electrons of the crystalline polymer nylon-11 □ phase, which leads to piezoelectric effects, was made. It was confirmed that the charge is concentrated in the region of interchain interaction, which is not destroyed by weak deformations of the polymer.

**Державний реєстраційний номер ДіР:**

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:** Енергетика та енергоефективність

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:** Освоєння нових технологій транспортування енергії, впровадження енергоефективних, ресурсозберігаючих технологій, освоєння альтернативних джерел енергії

**Підсумки дослідження:** Нове вирішення актуального наукового завдання

**Публікації:**

- Balabai R.M., Zadorozhnii V.M. Ab initio study of the piezoelectric effects of the 2D semiconductors of IV group monochalcogenides (GeSe, GeS) // Molecular Crystals and Liquid Crystals. 2023, Volume 765, Issue 1, P.97-104.
- Balabai R.M., Zadorozhnii V.M. The piezoelectric activity in the HfO2 nanoclusters. Molecular Crystals and Liquid Crystals. 2024, VOL. 768, NO. 18, pp. 1254–1265.
- Balabai R.M., Zadorozhnii V.M., Bondarenko O. Piezoelectric response of α-form poly(L-lactic acid) to mechanically stressed state // Ukrainian Journal of Physics. 2025, VOL. 70, NO. 2, pp. 109–117.

**Наукова (науково-технічна) продукція:** технології; матеріали; методи, теорії, гіпотези

**Соціально-економічна спрямованість:** поліпшення стану навколишнього середовища; підвищення продуктивності праці

**Охоронні документи на ОПІВ:**

**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., професор, 01.04.07

**Ідентифікатор ORCHID 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:**

**Сектор науки:** Університетський

## VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Покутній Сергій Іванович

2. Sergii I. Pokutnyi

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., професор, 01.04.05

**Ідентифікатор ORCHID ID:** 0000-0002-4160-1940

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 03291669

**Місцезнаходження:** вул. Генерала Наумова, буд. 17, Київ, 03164, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

**Сектор науки:** Академічний

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Опанасюк Анатолій Сергійович

2. Anatoliy S. Opanasyuk

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., професор, 01.04.01

**Ідентифікатор ORCHID ID:** 0000-0002-1888-3935

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Сумський державний університет

**Код за ЄДРПОУ:** 05408289

**Місцезнаходження:** вул. Харківська, буд. 116, Суми, Сумський р-н., 40007, Україна

**Форма власності:** Державна

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

**Ідентифікатор ROR:**

**Сектор науки:** Університетський

**Рецензенти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Возняк Андрій Васильович

2. Andrei V. Voznyak

**Кваліфікація:** к. т. н., доц., 05.17.06

**Ідентифікатор ORCHID ID:** 0000-0003-4683-1136

**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:**

**Сектор науки:** Університетський

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Слюсаренко Микола Анатолійович
2. Mykola A. Slyusarenko

**Кваліфікація:** к. пед. н., доц., 13.00.09

**Ідентифікатор ORCHID ID:** 0000-0003-0288-5482

**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:**

**Сектор науки:** Університетський

## VIII. Заключні відомості

| | |
|---|---|
| **Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради** | Білинський Ігор Васильович |
| **Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні** | Білинський Ігор Васильович |
| **Відповідальний за підготовку облікових документів** | Данченко Тетяна Сергіївна |
| **Реєстратор** | УкрІНТЕІ |
| **Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності** | Юрченко Тетяна Анатоліївна |