Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U001540

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-10-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Здещиц Анастасія Валеріївна

2. Zdeshchyts Anastasiia

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: 02-10-2019

Спеціальність за освітою: 8.04020301

Місце роботи здобувача: Науково-дослідний гірничорудний інститут Державного вищого навчального закладу "Криворізький національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 37664469

Місцезнаходження: 50086, Дніпропетровська обл., м.Кривий Ріг, пр.Гагаріна, 57

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): К 41.053.07

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Криворізький державний педагогічний університет

Код за ЄДРПОУ: 40787802

Місцезнаходження: 50086, Дніпропетровська обл., м. Кривий Ріг , пр-т Гагаріна, 54.

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.03

Тема дисертації:

1. Електронні властивості гібридних наноструктур

2. Electronic properties of hybrid nanostructures

Реферат/анотація:

1. Об'єкт дослідження - гібридні наноструктури. Мета і завдання дослідження. Метою дисертаційної роботи є визначення фізичних параметрів при перетворенні архітектури гібридних наноструктур, шляхом розрахунку електронної густини за допомогою програмного засобу. Методи дослідження: застосовувалися методи теорії функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів, які були реалізовані у формі ефективної і зручної у використанні авторської комп'ютерної програми. Наукова новизна отриманих результатів: 1. Заборонена зона (0,082 еВ) у наноструктурі, яка складена тільки з вуглецевих нанотрубок, розміщеними між плівками кремнію, зменшується до значення 0,012 еВ при її доповнені волокном поліпарафенілену. 2. Ширина забороненої зони структур із графену або оксиду графену та фрагментів бішарової плівки ZnO чутлива до орієнтації ZnO як відносно площини графену, так і оксиду графену. При певному розташуванні компонентів структури заборонена зона зникає. Гібридні структури із графену та ZnO більш енергетично вигідно формувати кисневою атомною площиною ZnO, повернеою до графену. 3. Ширина забороненої зони наноцелюлози зменшується майже в 2 рази при доповненні до неї інших

структурних матеріалів: площини графену, нанокластерів міді. При механічному стисканні композиту валентна зона зменшується. Практичне значення: виготовлення тонкоплівкових структур ZnO/Gr/ZnO, а саме оптимізації розташування компонентів у внутрішній архітектурі гібриду; виготовлення механічних сенсорів на основі кристалічної наноцелюлози. Встановлено, що електронні властивості гібридних композитних структур на основі нанокристалічної целюлози та графеноподібного оксиду цинку або графену можна контролювати шляхом зміни відстані між шарами складових компонентів композиту, що відбуваються під час механічного стискання.

2. The object of study is hybrid nanostructures. The purpose and objectives of the study. The purpose of the dissertation is to determine the physical parameters in the transformation of the architecture of hybrid nanostructures, by calculating the electronic density using a software tool. Research Methods: The methods of electronic density functional theory and pseudopotential were applied according to the first principles, which were implemented in the form of an efficient and easy-to-use authoring computer program. Scientific novelty of the obtained results: 1. The band gap (0.082 eV) in the nanostructure, which is composed only of carbon nanotubes placed between the silicon films, is reduced to the value of 0.012 eV when supplemented with polyparaphenylene fiber. 2. The band gap of graphene or graphene oxide structures and ZnO bilayer film fragments is sensitive to the orientation of ZnO both relative to the plane of graphene and graphene oxide. With a certain arrangement of the components of the structure, the band gap disappears. Hybrid structures made of graphene and ZnO are more energetically advantageous to form with the oxygen atomic plane ZnO returned to graphene. 3. The band gap of nanocellulose decreases almost 2 times when supplemented with other structural materials: the plane of graphene, copper nanoclusters. In mechanical compression of the composite, the valence band decreases. Practical value: production of ZnO / Gr / ZnO thin-film structures, namely optimization of component placement in the hybrid's internal architecture; manufacturing of mechanical sensors based on crystalline nanocellulose. It is established that the electronic properties of hybrid composite structures based on nanocrystalline cellulose and graphene zinc or graphene oxide can be controlled by changing the distance between the layers of the composite components that occur during mechanical compression.

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. Балабай Руслана Михайлівна

2. Balabai Ruslana

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. Ясковець Іван Іванович
2. Ясковець Іван Іванович

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. Ніцук Юрій Андрійович
2. Ніцук Юрій Андрійович

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 Ків Арік Юхимович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Ків Арік Юхимович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.