Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0525U000029

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 20-01-2025

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гомоннай Олександр Олександрович

2. Oleksandr O. Gomonnai

Кваліфікація: к. ф.-м. н., доц., 01.04.10

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3240-2947

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 13-02-2025

Спеціальність за освітою: Фізик. Інженер

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

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: вул. Підгірна, буд. 46, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 61.051.01

Повне найменування юридичної особи: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: вул. Підгірна, буд. 46, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

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: вул. Підгірна, буд. 46, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.19.15, 29.19.19, 29.19.35, 29.33.47, 31.15.03

Тема дисертації:

1. Трансформація електронних і фононних станів у кристалах типу TlInS2 в області фазових переходів і при просторовому обмеженні

2. Transformation of electron and phonon states in TlInS2-type crystals in the range of phase transitions and upon confinement

Реферат:

1. Дисертацію присвячено з’ясуванню природи та особливостей фізичних процесів у шаруватих халькогенідних сегнетоелектриках типу TlInS2 в області фазових переходів і при легуванні та просторових обмеженнях і можливостей формування композитів на їх основі. Методами функціоналу густини проведено розрахунки фізичних характеристик кристалів TlInS2, TlIn(S0.75Se0.25)2 і наношарів TlInS2 та експериментальні дослідження оптичних (еліпсометрія, раманівське розсіювання, двопроменезаломлення, кут повороту оптичної індикатриси, поглинання) та пружних властивостей кристалів TlIn(S1 xSex)2. У рамках першопринципного підходу в різних наближеннях (DFT/PBE-D, DFT/LDA-D+U) проведено дослідження енергетичних зонних спектрів, повних та парціальних густин електронних станів кристалів TlInS2 і

TlIn(S0.75Se0.25)2. У наближеннях DFT/PBE-D+U розраховано дійсну та уявну частини діелектричної функції, спектральні поляризаційні залежності коефіцієнтів поглинання, показників відбивання та коефіцієнтів екстинкції кристалів TlInS2 і TlIn(S0.75Se0.25)2, для яких виявлено незначну анізотропію. Результати розрахунків порівняно з отриманими експериментальними даними оптичної спектроскопії (оптичне поглинання та еліпсометрія). У результаті спектроеліпсометричних досліджень кристалів TlIn(S1 xSex)2 (0 < x ≤ 0.25) в області 1–5 еВ у температурному інтервалі 133 К–300 К проведено аналіз обумовлених ізовалентним заміщенням та температурою змін спектральних залежностей дійсної та уявної частин діелектричної функції, показника заломлення та коефіцієнта екстинкції. У результаті досліджень спектрів раманівського розсіювання світла кристалів TlIn(S1 xSex)2 при найменшому досягнутому прояві фонон-фононної взаємодії (30 К) проаналізовано композиційну поведінку частот, напівширин та інтегральних інтенсивностей фононних мод в інтервалі 0 < x ≤ 0.25, та їх зміни в області фазових переходів. Встановлено T-x діаграму кристалів TlIn(S1 xSex)2 (0 ≤ x ≤ 0.25) та уточнено T-p діаграму кристала TlInS2. Проведено квантово-хімічні розрахунки електронних властивостей для наношарів TlInS2 різної товщини з використанням коду Vienna Ab Initio Simulation Package на основі теорії функціоналу електронної густини, при цьому використано функцію обмінно-кореляційного функціоналу Форде-Берка-Ернцергофа в рамках узагальненого градієнтного наближення. З'ясовано умови кристалізації TlInS2 та TlInSe2 у аморфних плівках та формування нанокристалів різної морфології TlInS2, SbSI та Sn2P2S6 у композитах на основі As2S3 і TlInSe2 у склі As2Se3 у результаті дії лазерного випромінювання та/або температурного відпалу.

2. The thesis is devoted to elucidation of the nature and specific features of physical processes in layered chalcogenide ferroelectrics of TlInS2 type in the region of phase transition as well as upon doping and spatial confinement and possibilities of formation of composites on their base. For this purpose density functional theory (DFT) calculations of physical characteristics of TlInS2 and TlIn(S0.75Se0.25)2 crystals and TlInS2 nanolayers were performed as well as experimental studies of optical (ellipsometry, Raman scattering, birefringence, angle of optical indicatrix rotation, absorption) and elastic properties of TlIn(S1 xSex)2 crystals. In the framework of ab initio approach, different approximations (DFT/PBE-D, DFT/LDA-D+U) were used to study the energy band structure, full and partial densities of electron states of TlInS2 and TlIn(S0.75Se0.25)2 crystals. The DFT/PBE-D+U approximations were used to calculate the real and imaginary parts of the dielectric function, spectral polarization dependences of absorption coefficients, reflection indices and extinction coefficients of TlInS2 and TlIn(S0.75Se0.25)2 crystals, for which a slight anisotropy was found. Based on the spectroscopic ellipsometry studies of TlIn(S1 xSex)2(0 < x ≤ 0.25) crystals in the 1–5 eV range in the temperature interval 133 K–300 K, isovalent substitution-related and temperature-related variations of spectral dependences of the real and imaginary parts of the dielectric function, refractive index end extinction coefficient are analysed. Based on Raman scattering studies of TlIn(S1 xSex)2 performed at lowest achieved phonon-phonon coupling (30 K), compositional behaviour of phonon mode frequencies, halfwidths, and integrated intensities in the 0 < x ≤ 0.25 range and their changes in the region of phase transitions are analyses. The T-x diagram of TlIn(S1 xSex)2 crystals (0 ≤ x ≤ 0.25) was established and the T-p diagram of the TlInS2 crystal was refined. Quantum-chemical calculations of electronic properties for TlInS2 nanolayers of various thickness are performed using Vienna Ab Initio Simulation Package code based on electronic density functional theory, Perdew-Burke-Ernzerhof exchange-correlation functional being used in the framework of the generalized gradient approximation. Conditions of crystallisation of TlInS2 and TlInSe2 in amorphous films and formation of TlInS2, SbSI and Sn2P2S6 nanocrystals of various morphology in composites based on As2S3 and TlInSe2 in As2Se3 glass as a result of laser radiation and/or thermal annealing were elucidated .

Державний реєстраційний номер ДіР: немає

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій виробництва матеріалів, їх оброблення і з'єднання, створення індустрії наноматеріалів та нанотехнологій

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Gomonnai, O.O., Gordan, O., Guranich, P.P., Slivka, A.G., Gomonnai, A.V., Zahn, D.R.T. (2017). Temperature-dependent dielectric functions and interband critical points of sulfur-rich TlIn(S1-xSex)2 layered solid solution crystals. Applied Surface Science, 424 (3), 383-388. doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.01.228.
- Guranich, P.P., Rosul, R.R., Gomonnai, O.O., Slivka, A.G. Roman, I.Yu., Gomonnai, A.V. (2014). Ferroelastisity of TlInS2 crystal. Solid State Communication, 184, 21–24. doi.org/10.1016/j.ssc.2013.12.034.
- Azhniuk, Yu.M., Villabona, A., Gomonnai, A.V., Rubish, V.M., Marjan, V.M., Gomonnai, O.O., Zahn, D.R.T. (2014). Raman and AFM studies of (As2S3)0.45(SbSI)0.55 thin films and bulk glass. Journal of Non-Crystalline Solids, 396-397, 36-40. doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2014.04.015.
- Gomonnai, A.V., Petryshynets, I., Azhniuk, Yu.M., Gomonnai, O.O., Roman, I.Yu., Turok, I.I., Solomon, A.M., Rosul, R.R., Zahn, D.R.T. (2013). Growth and characterisation of sulphur-rich TlIn(S1–xSex)2 single crystals. Journal of Crystal Growth, 367 (1), P. 35-41. doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2013.01.008.
- Martynyuk-Lototska, I., Roman, I., Gomonnai, O., Kryvyy, T., Mys, O., Vlokh, R. (2018). Acoustic and elastic anisotropies of acoustooptic Tl3PSe4 crystals. Acta Acustica united with Acustica, 104 (6), 956-962. doi.org/10.3813/AAA.919261.
- Azhniuk, Yu.M., Gomonnai, A.V., Rubish, V.M., Rigan, M.Yu., Solomon, A.M., Gomonnai, O.O., Guranich, O.G., Petryshynets, I., Zahn, D.R.T. (2013). In situ Raman observation of laser-induced formation of TlInSe2 crystallites in Tl–In–As–Se glass. Journal of Physics and Chemistry of Solids, 74 (10). 1452-1458. doi.org/10.1016/j.jpcs.2013.05.005).
- Azhniuk, Yu.M., Gomonnai, A.V., Lopushansky, V.V., Gomonnai, O.O., Babuka, T., Loya, V.Y., Voynarovych, I.M. (2023). Laser-induced transformations in thermally evaporated thin TlInSe2 films studied by Raman spectroscopy. Ukrainian Journal of Physics, 68 (12), 816-821. doi.org/10.15407/ujpe68.12.816.
- Babuka, T., Gomonnai, O., Glukhov, K.E., Kharkhalis, LYu., Gomonnai, A.V., Makowska-Janusik, M. (2022). The first principle study of substitutional impurities' effect on elastic properties of TlInS2 layered crystal. Low Temperature Physics, 48 (1), 57-63. doi.org/10.1063/10.0008965.
- Babuka, T., Gomonnai, O.O., Glukhov, K.E., Kharkhalis, L.Yu., Gomonnai, A.V., Makowska-Janusik, M. (2021). Theoretical and experimental studies of electronic and optical properties of layered TlIn(S0.75Se0.25)2 ferroelectric crystal . Integrated Ferroelectrics, 220, 18-29. doi.org/10.1080/10584587.2021.1921531.
- Adamenko, D., Say, A., Martynyuk-Lototska, I., Mys, O., Kostyrko, M., Gomonnai, O.O., Gomonnai, A.V., Vlokh, R. (2020). (x, T)-phase diagram of TlIn(S1-xSex)2 solid solutions (x = 0, 0.02, 0.06, 0.10, 0.15 and 0.25). Temperature dependences of thermal expansion and optical anisotropy parameters. Phase Transitions, 93 (9), 935-944. doi.org/10.1080/01411594.2020.1813292.
- Say, A., Martynyuk-Lototska, I., Mys, O., Adamenko, D., Kostyrko, M., Gomonnai, O., Vlokh, R. (2020). Temperature dependences of optical indicatrix and thermal expansion parameters of TlIn(S1–xSex)2 solid solutions (x = 0, 0.02 and 0.06). Ukrainian Journal of Physical Optics, 21 (2), 57-64. doi: 10.3116/16091833/21/2/57/2020.
- Adamenko, D., Krupych, O., Kostyrko, M., Gomonnai, O., Gomonnai, A., Vlokh, R. (2020). Faraday effect in TlIn(S1–xSex)2 solid solutions (x = 0, 0.02, 0.06, 0.10, 0.15 and 0.25). Ukrainian Journal of Physical Optics, 21 (4), 178-183. doi: 10.3116/16091833/21/4/178/2020.
- Babuka, T., Gomonnai, O.O., Glukhov, K.E., Kharkhalis, L.Yu., Sznajder, M., Zahn, D.R.T. (2019). Electronic and optical properties of the TlInS2 crystal: theoretical and experimental studies. Acta Physica Polonica A, 136 (4), 640-644. doi: 10.12693/APhysPolA.136.640.
- Say, A., Adamenko, D., Gomonnai, O., Roman, I., Martynyuk-Lototska, I., Vlokh, R. (2019). Anisotropy of thermal expansion of TlGaSe2 crystals. Phase Transitions, 92 (9), 824-830. doi.org/10.1080/01411594.2019.1642475.
- Guranich, P.P., Rosul, R.R., Gomonnai, O.O., Rubish, V.M., Gomonnai, A.V., Slivka, A.G., Huranych, P. (2019). Phase (x, T) and (p, T) diagrams of TlIn(S1-xSex)2 polycrystal in the compositional range 0≤ x ≤ 0.15. Phase

Transitions, 92 (5), 508-516. doi.org/10.1080/01411594.2019.1597097.
- Martynyuk-Lototska, I., Mys, O., Say, A., Trach, I., Adamenko, D., Gomonnai, O.O., Roman, I., Vlokh, R. (2019). Anisotropy of acoustic and thermal expansion properties of TlInSe2 crystals. Phase Transitions, 92 (1), 23-35. doi.org/10.1080/01411594.2018.1545227.
- Gomonnai, O.O., Ludemann, M., Gomonnai, A.V., Roman, I.Yu., Slivka, A.G., Zahn, D.R.T. (2018). Low-temperature Raman studies of sulfur-rich TlIn(S1-xSex)2 single crystals. Vibrational Spectroscopy, 97, 114-118 doi.org/10.1016/j.vibspec. 2018.05.0.
- Gomonnai, O., Gordan, O., Guranich, P., Huranich, P., Slivka, A., Gomonnai, A., Zahn, D.R.T. (2017). Spectroscopic ellipsometry studies and temperature behaviour of the dielectric function of TlInS2 single crystal. Journal of Nano- and Electronic Physics, 9 (5), No 05025 (6 pages). doi:10.21272/jnep.9(5).05025.
- Gomonnai, O.O., Rosul, R.R., Guranich, P.P., Slivka, A.G., Roman, I.Yu., Rigan, M.Yu. (2012). Optical properties of TlInS2 layered crystal under pressure. High Pressure Research, 32 (1), 39-42. doi.org/10.1080/08957959.2011.635144.
- Gomonnai, O.O., Ludemann, M., Gomonnai, A.V., Roman, I.Yu., Slivka, A.G., Zahn, D.R.T. (2019). Temperature dependence of Raman-active modes of TlIn(S0.95Se0.05)2 single crystals. Ukrainian Journal of Physics, 64 (2), 173-178. doi.org/10.15407/ujpe64.2.173.
- Azhniuk, Yu.M., Gomonnai, A.V., Gomonnai, O.O., Hasynets, S.M., Kováč, F., Lopushansky, V.V., Petryshynets, I., Rubish, V.M., Zahn, D.R.T. (2015). Annealing-induced formation of Sn2P2S6 crystallites in As2S3-based glass matrix. Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics, 18 (3), 248-254. doi: 10.15407/spqeo 18.03.248).
- Гуранич, П.П., Росул, Р.Р., Гомоннай, О.О., Сливка, О.Г., Гомоннай, О.В., Роман, І.Ю. (2014). Піроелектричні властивості кристалів TlIn(S0.99Se0.01)2 при високих тисках. Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика, 35, 57-60. doi.org/10.24144/2415-8038.2014.35.57-60.
- Гуранич, П.П., Росул, Р.Р., Гомоннай, О.О., Сливка, О.Г., Гомоннай, О.В., Роман, І.Ю. (2014). Доменна структура в кристалах TlInS2 при високих тисках. Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика, 36, 77-80. doi.org/10.24144/2415-8038.2014.36.77-80.
- Rosul, R.R., Guranich, P.P., Gomonnai, O.O., Slivka, A.G., Rigan, M.Yu., Rubish, V.M., Guranich, O.G., Gomonnai, A.V. Dielectric properties of TlIn(S1-xSex)2 polycrystals near phase transitions. (2012). Semiconductor Physics, Quantum Electronics and Optoelectronics, 15 (1), 35-37. doi.org/10.15407/spqeo15.01
- Росул, Р.Р., Гуранич, П.П., Гомоннай, О.О., Сливка, О.Г., Хмара, О.М., Гомоннай, О.В., Роман, І.Ю. (2012). Температурна та барична поведінка краю фундаментального поглинання монокристалів TlIn(S0.98Se0.02)2. Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика, 31, 23-28. doi.org/10.24144/2415-8038.2012.31.23-28).
- Гомоннай, О.О., Гуранич, П.П., Росул, Р.Р., Сливка, О.Г., Роман, І.Ю., Риган, М.Ю. (2010). Оптичні властивості сегнетоелектриків TlInS2 в околі фазових переходів. Сенсорна електроніка і мікросистемні технології, 7 (3). 61-64. doi.org/10.18524/1815-7459.2010.3.114440.
- Росул, Р.Р., Гуранич, П.П., Гомоннай, О.О., Риган, М.Ю., Рубіш, В.М., Сливка, О.Г. (2010). Діелектричні властивості полікристалів TlIn(S0.96Se0.04)2 при високих гідростатичних тисках. Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика, 28, 41-46.

Наукова (науково-технічна) продукція: матеріали

Соціально-економічна спрямованість: створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Охоронні документи на ОПІВ:

Винаходи, корисні моделі, промислові зразки

Патент № 106518 C2 Україна: МПК H 01 L 41/18. Сегнетоелектричний матеріал / Риган, М.Ю., Росул, Р.Р., Гуранич, О.Г., Гомоннай, О.В., Гомоннай, О.О., Рубіш, В.М., Штець, П.П., Соломон, А.М. Заявлено

07.09.2012. Опубліковано 10.09.2014 р. Бюл. № 17.

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0109U000871; 0112U001555; 0115U001096; 0118U000175; 0117U006454; 0121U114007.

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Стадник Василь Йосифович
2. Vasyl Stadnyk

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.10

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-7820-7886

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Галян Володимир Володимирович
2. Volodymyr Halyan

Кваліфікація: д. ф.-м. н., доцент, 01.04.10

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-0066-7174

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: проспект Волі, буд. 13, Луцьк, Луцький р-н., 43025, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Джаган Володимир Миколайович

2. Volodymyr Dzhagan

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.10

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7839-9862

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05941695

Місцезнаходження: , 03028

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Височанський Юліан Миронович

2. Yulian M. Vysochanskii

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-2501-1780

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: вул. Підгірна, буд. 46, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Різак Василь Михайлович

2. Vasyl Rizak

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.10

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9177-0662

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: вул. Підгірна, буд. 46, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Небола Іван Іванович
2. Ivan I. Nebola

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-7087-1384

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: вул. Підгірна, буд. 46, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

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	Грабар О.О.
Реєстратор	УкрІНТЕІ
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна