

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0823U101362

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 20-11-2023

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шендер Ірина Олександрівна

2. Shender Iryna O.

Кваліфікація: н.с.

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 105

Назва наукової спеціальності: Прикладна фізика та наноматеріали

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Прикладна фізика та наноматеріали

Дата захисту: 18-01-2024

Спеціальність за освітою: прикладна фізика та наноматеріали

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): ДФ 61.051.100

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: 29.19.11, 29.19.15, 29.19.17, 29.31.26

Тема дисертації:

1. Вплив ізовалентного катіонного заміщення на фізичні властивості суперіонних провідників $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$.
2. Effect of isovalent cation substitution on the physical properties of $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$ superionic conductors.

Реферат:

1. Уперше отримано монокристалічні зразки та виготовлено суперіонні кераміки твердих розчинів складу $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$. Уперше вивчено структурні властивості отриманих твердих розчинів, проведено моделювання кристалічної структури та з'ясовано механізм іонного транспорту. Для отримання масиву даних застосовано теоретичні методи прогнозування фізичних властивостей у межах підходу теорії функціонала густини, що сприяло оптимізації процесу вибору кращих за властивостями зразків для подальших досліджень. Уперше проведено частотно-температурні дослідження електропровідності досліджуваних зразків та встановлено, що температурні залежності іонної провідності мають лінійний характер і описуються законом Арреніуса, що підтверджує термоактиваційний характер провідності. Виміряні залежності електропровідності від частоти для досліджуваних зразків кераміки мають типову

поведінку як для монокристалів твердих розчинів, так і для керамічних зразків. Уперше проведено дослідження оптичних характеристик монокристалів твердих розчинів складу $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$: визначено край власного поглинання монокристалів твердих розчинів $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$ в інтервалі температур 77–300 К. Розраховано значення псевдоширини забороненої зони та встановлено, що підвищення температури приводить до монотонного зменшення її значення. Уперше застосовано метод спектроскопії дифузного відбиття з подальшим аналізом із використанням функції Кубелки–Мунка та графічного методу Таука для оцінки псевдоширини забороненої зони таких складних об'єктів, як тверді розчини на основі сполуку структури аргіродиту складу $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$. У результаті проведених досліджень вказує на розупорядкування кристалічних структур твердих розчинів $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$ внаслідок катіонного заміщення Si^{4+} на Ge^{4+} у межах аніонної підґратки. Установлено наявність розмірного ефекту мікротвердості при мікроіндентуванні монокристалів та керамічних зразків твердих розчинів $\text{Ag}_7\text{Si}_{1-x}\text{GexS}_5\text{I}$. З'ясовано, що при зменшенні іонного радіуса при ізовалентному заміщенні Si^{4+} на Ge^{4+} мікротвердість кристалів зростає, що свідчить про підвищення жорсткості кристалічної структури вказаних матеріалів.

2. For the first time, single crystal samples have been obtained, and superionic ceramics of solid solutions of the $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$ composition have been prepared. For the first time, the structural properties of the obtained solid solutions have been studied, the crystal structure has been modeled, and the mechanism of ion transport has been ascertained. Theoretical methods for predicting the physical properties within the framework of the density functional theory approach have been used to obtain the data set, which contributed to the optimization of the process of selecting the samples with the best properties for further research. For the first time, frequency-temperature studies of the electrical conductivity inherent to the studied samples have been carried out, and it has been ascertained that the temperature dependences of the ionic conductivity are linear and described by the Arrhenius law, which confirms the thermally activated nature of the conductivity. The measured dependences of electrical conductivity on frequency for the examined ceramic samples have typical behavior both for single crystals of solid solutions and for ceramic samples. For the first time, a study of the optical characteristics of single crystals of solid solutions of the $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$ composition has been carried out: the intrinsic absorption edge of single crystals of $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$ solid solutions has been determined within the temperature range 77–300 K. The value of the pseudogap has been calculated, and it has been ascertained that an increase in temperature leads to a monotonous decrease in its value. For the first time, the method of diffuse reflectance spectroscopy with further analysis by using the Kubelka–Munk function and the Tauc graphical method has been applied to estimate the pseudogap of these complex objects, namely, solid solutions based on compounds of the structure of the $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$ composition inherent to argyrodites. As a result of the research indicates disordering of the crystal structures of $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$ solid solutions as a result of cation substitution Si^{4+} on Ge^{4+} within the anionic sublattice. The presence of a dimensional effect of microhardness during microindentation of single crystals and ceramic samples of $\text{Ag}_7\text{Si}_{1-x}\text{GexS}_5\text{I}$ solid solutions has been ascertained. It has been also ascertained that when the ion radius decreases at the Si^{4+} on Ge^{4+} isovalent substitution, the microhardness of the crystals increases, which indicates an increase in the rigidity of the crystal structure in these materials.

Державний реєстраційний номер ДіР: 0118U000171, 0121U109484, 0121U107680, 0122U000934

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

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

Підсумки дослідження: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- 1. Studenyak I.P., Pogodin A.I., Shender I.A., Filep M.J., Kokhan O.P., Kopčanský P. Electrical properties of cation-substituted single crystals. SPQEO. 2021; 24(3):241-7. <https://doi.org/10.15407/spqeo24.03.241>.
- 2. Погодін А.І., Філеп М.Й., Кохан О.П., Малаховська Т.О., Шендер І.О., Студеняк І.П. Особливості вирощування монокристалів твердих розчинів в системах $\text{Ag}_6\text{PS}_5\text{InAg}_7\text{GeS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{InAg}_7\text{GeS}_5\text{I}$. Вісник Ужгородського університету. Сер. Хімія. 2021; 45(1):29-34. <https://doi.org/10.24144/2414-0260.2021.1.29-34>.
- 3. Погодін А.І., Філеп М.Й., Шендер І.О., Кохан О.П., Студеняк І.П. Взаємодія у системах $\text{Ag}_6\text{PS}_5\text{I}-\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}$ та $\text{Ag}_7\text{GeS}_5\text{I}-\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{I}$. Вісник Ужгородського університету. Сер. Хімія. 2021; 45(1):42-46. <https://doi.org/10.24144/2414-0260.2021.1.42-46>.
- 4. Studenyak I.P., Pogodin A.I., Shender I.A., Studenyak V.I., Filep M.J., Symkanych O.I., Kokhan O.P., Kúš P. Electrical properties of ceramics based on $\text{Ag}_7\text{TSS}_5\text{I}$ (T = Si, Ge) solid electrolytes. J. Solid State Chem. 2022; 309:122961. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2022.122961>.
- 5. Pogodin A.I., Studenyak I.P., Shender I.A., Pop M.M., Filep M.J., Malakhovska T.O., Kokhan O.P., Kopčanský P., Babuka T.Y. Crystal structure, ion transport and optical properties of new high-conductivity $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$ solid solutions. J. Mater. Sci. 2022; 57(12):6706-22. <https://doi.org/10.1007/s10853-022-07059-1>.
- 6. Pogodin A., Malakhovska T., Filep M., Kokhan O., Shender I., Studenyak Y., Zhukova Y. Optical pseudogap of $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$ solid solutions. Ukr. J. Phys. Opt. 2022; 23(2):77-85. <https://doi.org/10.3116/16091833/23/2/77/2022>.
- 7. Pogodin A.I., Pop M.M., Shender I.A., Studenyak I.P., Filep M.J., Malakhovska T.O., Kokhan O.P., Babuka T.Y., Suslikov L.M., Rubish V.M. Influence of order-disorder effects on the optical parameters of $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$ -mixed crystals. J. Mater. Sci.: Mater. Electron. 2022; 33:15054-15066. <https://doi.org/10.1007/s10854-022-08422-3>.
- 8. Малаховська Т.О., Погодін А.І., Філеп М.Й., Поп М.М., Шендер І.О., Кохан О.П., Васько Ю.Ю., Жукова Ю.П., Студеняк Я.І., Сусліков Л.М. Оптичні властивості твердих розчинів системи $\text{Ag}_7\text{SiS}_5\text{InAg}_7\text{GeS}_5\text{I}$. Науковий вісник Ужгородського університету. Сер. Хім. 2022; 47(1):46-52. <https://doi.org/10.24144/2414-0260.2022.1.46-52>.
- 9. Pogodin A., Filep M., Malakhovska T., Vakulchak V., Komanicky V., Vorobiov S., Izai V., Shender I., Bilanych V., Kokhan O., Kúš P. Recrystallization effect on mechanical parameters and increasing of Ag^+ ionic conductivity in $\text{Ag}_7(\text{Si}_{1-x}\text{Gex})\text{S}_5\text{I}$ ceramic materials. Solid State Sci. 2023; 140:107203. <https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2023.107203>.

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість: економія енергоресурсів

Охоронні документи на ОПВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0118U000171, 0121U109484, 0121U107680, 0122U000934

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сусліков Леонід Михайлович

2. Leonid M. Suslikov

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-2464-9608

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:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Стадник Василь Йосифович

2. Vasyl Y. Stadnyk

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-7820-7886

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 35615288600; Web of Science Researcher ID: E-4578-2019;
<https://scholar.google.com/citations?hl=en&user=82Ak5jsAAAAJ>

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. Ажнюк Юрій Миколайович

2. Yurii M. Azhniuk

Кваліфікація: д. ф.-м. н., ст.н.с., 01.04.10

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9414-0252

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут електронної фізики Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540008

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 21, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Хархаліс Любов Юріївна

2. Liubov Y. Kharkhalis

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

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

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. Гомоннай Олександр Олександрович

2. Oleksandr O. Gomonnai

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

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

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**

Грабар Олександр Олексійович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні**

Грабар Олександр Олексійович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Сабов Вікторія Іванівна

Реєстратор

УкрІНТЕІ

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**



Юрченко Тетяна Анатоліївна