

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0519U000447

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 11-06-2019

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Дмитрук Андрій Миколайович

2. Dmytruk Andriy Mykolayovych

**Кваліфікація:** к. ф.-м. н., 01.04.05

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** доктор наук

**Аспірантура/Докторантура:** ні

**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:** 04-06-2019

**Спеціальність за освітою:** радіофізика та електроніка

**Місце роботи здобувача:** Інститут фізики НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417302

**Місцезнаходження:** проспект Науки, 46, м. Київ, Київська обл., 03028, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **III. Відомості про організацію, де відбувся захист**

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** Д 26.159.01

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут фізики НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417302

**Місцезнаходження:** проспект Науки, 46, м. Київ, Київська обл., 03028, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

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

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут фізики НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05417302

**Місцезнаходження:** проспект Науки, 46, м. Київ, Київська обл., 03028, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 29.19.04

**Тема дисертації:**

1. Структура субнанометрових неорганічних кластерів і її прояв у макрофізичних властивостях наносистем.
2. The structure of subnanometer inorganic clusters, and its exhibition in macrophysical properties of nanosystems.

**Реферат:**

1. В дисертаційній роботі виявлено особливості будови атомарних кластерів неорганічних напівпровідникових матеріалів, встановлено зв'язки між будовою кластерів і структурою макрочастинок відповідних матеріалів, описано виготовлення і досліджено властивості нанокомпозитів. Виявлено кластери підвищеної стабільності ("магічні") в мас-спектрах лазерної абляції пероксиду цинку, запропоновано серію вкладених оболонок, яка їх описує з атомарною точністю. Квантово-хімічними обчисленнями виявлено зниження симетрії кластерів ZnO, пояснене ефектом Яна-Теллера, запропоновано модель зародкоутворення тетраподів. В мас-спектрах лазерної абляції йодидів кремнію і германію ідентифіковано серії кластерів різної структури: ланцюжкові, кільцеві, об'ємні. Квантово-хімічними обчисленнями визначено структури найстабільніших ізомерів, обчислено їхні спектри ІЧ і КР. Розроблено метод синтезу водних колоїдів "магічних" кластерів CdSe, встановлено роль функціональних груп сурфактанту — цистеїну. Запропоновано ряд практичних застосувань наноструктур.

2. The thesis describes found peculiarities of structure of atomic clusters of inorganic semiconductor materials, establishes connections between the structure of the clusters and structure of macroparticles of the corresponding materials, and reports methods of production and studies of properties of the nanocomposite materials important for modern nanophysics and nanoengineering. Zinc peroxide has been suggested and used as a precursor for the production of zinc oxide clusters. The mass spectra of clusters  $(\text{ZnO})_n$  have been measured, in which the clusters of enhanced stability, so called "magic" clusters,  $(\text{ZnO})_n$  have been found at  $n = 34, 60, 78, 168$ . The increase in the efficiency of the formation of the "magic" clusters of ZnO and CdSe was found catalyzed by alkylamines. A series of nested shells of  $(\text{ZnO})_n$ ,  $n = 12m^2$ ,  $m = 1, 2, 3, \dots$  is proposed. It describes the "magic" clusters at  $n = 60, 168$  with "atomic accuracy", and predicts the composition and structure of the next "magic" clusters in the series at  $n = 360, 660$  and larger, which are still undiscovered. The shells are classified in the notations of Goldberg and Conway. Quantum-chemical calculations revealed the symmetry reduction of the nested-shell clusters of ZnO, which is explained by the Jahn-Teller effect. A model of ZnO tetrapod nucleation has been elaborated. Iodine has been used as a terminator of "broken" bonds in Si and Ge clusters. The series of clusters of  $\text{Si}_n\text{I}_m$  and  $\text{Ge}_n\text{I}_m$  of different structures (chains, rings, cages) have been identified in the mass spectra of the products of laser ablation of  $\text{SiI}_4$  and  $\text{GeI}_4$  powders. Quantum-chemical calculations revealed the structures of the most stable isomers of the clusters. Their IR and Raman spectra have been calculated. Subnanometer sized Ge clusters of cF8 crystalline structure (diamond structure) have been found in the amorphous silicon-germanium-manganese alloy films. New method for the synthesis of stable aqueous colloids of  $(\text{CdSe})_{33,34}$  "magic" clusters has been developed, and the role of functional groups of cysteine surfactant has been investigated. CdSe nanoplatelets of atomically precise thickness have been revealed in the cadmium octanoate matrix and characterized by optical absorption and photoluminescent spectroscopic methods, including time-resolved ones. Several practical applications of nanostructures are suggested. Porous silicon is used as a reducing agent for production of Ag, Au, Pt nanoparticles. The advantage of the method is the chemical purity of the resulting colloids. Porous silica exhibits a similar reductive activity: Ag nanoparticles of 1 nm and 10 nm in diameters are grown in pores of 3.5 nm and 13 nm diameters, respectively. Translucent conductive porous nanocomposite  $\text{SnO}_2@\text{SiO}_2$ , promising for applications in photoelectrochemical and photovoltaic devices, has been prepared by chemical vapor deposition method. The effect of photothermal sorption of gases in nanoporous glass (3.5 nm pore diameter) has been revealed. It manifests itself in the dynamic change of gas permeability through the membrane, when the membrane temperature is controlled by optical irradiation. The effect is caused by the change of the dominant diffusion mechanism (surface or bulk) of the gas with the variation of the temperature. The effect of the local field enhancement by plasmonic nanoparticles has been employed for optical recording in copper nanoparticles-silica nanocomposite, using second harmonic of the femtosecond Ti:Sa laser radiation for recording. The fundamental wavelength was used for erasing. Concentrated colloids of  $\text{Au}@\text{SiO}_2$  nanoparticles have been developed for application as a contrast agent for X-ray studies of living organisms.

**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 ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Дмитрук Андрій Миколайович
2. Dmytruk Andriy Mykolayovych

**Кваліфікація:** к. ф.-м. н., 01.04.05

**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. Дмитрук Андрій Миколайович
2. Dmytruk Andriy Mykolayovych

**Кваліфікація:** к. ф.-м. н., 01.04.05

**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. Юхимчук Володимир Олександрович
2. Yukhymchuk Volodymyr O.

**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. Дорошенко Ірина Юріївна

2. Dorochenko Iryna Yu.

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

**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. Єлісєєв Євген Анатолійович

2. Eliseev Evgen Anatoliyovich

**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

**Рецензенти**

**VIII. Заключні відомості**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
голови ради**

Яценко Леонід Петрович

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

Яценко Леонід Петрович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.