Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U003398

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-07-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шкирта Ігор Миколайович

2. Shkyrta Ihor M.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

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: 03-07-2019

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: Мукачівський державний університет

Код за ЄДРПОУ: 36246368

Місцезнаходження: вул. Ужгородська, 26, м. Мукачеве, Мукачівський р-н., Закарпатська обл., 89600, Україна

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): Д 61.051.01

Повне найменування юридичної особи: ДВНЗ "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження: пл. Народна, 3, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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, 46, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.07

Тема дисертації:

1. Дослідження дисперсійних залежностей фононного спектру складних кубічних кристалів в концепції надпросторової симетрії

2. Studies of dispersion dependences of complex cubic crystals phonon spectrum in the concept of superspace symmetry

Реферат/анотація:

1. Застосовано спосіб визначення структури складного кристалу, як (3+d)-мірної структури, у вигляді згортки мотиву з механізмом повторення. Розглянуто поетапне ускладнення кристалів з (2a⊓2a⊓2a)- та (2a⊓2a⊓4c)-надграткою, виходячи з простої кубічної гратки протокристалу, наведені Фур'є-компоненти матриці оператора дефекту мас. Розглянуті принципи теорії динаміки кристалічної гратки, в тому числі із врахуванням наслідків надпросторової симетрії для кристалів структурних типів NaCl, AuCu3 та BaTiO3. Сформульовані загальні симетрійні співвідношення, що накладаються узагальненою симетрією на опис динаміки гратки модульованих кристалів. Проаналізовано структури узагальнених динамічних матриць складних кристалів в традиційному і надпросторовому підходах з врахуванням амплітуд модуляційних функцій масового та силового збурення. Розглянуто динаміку гратки кристалів типу BaTiO3 в концепції

надпросторової симетрії. На основі побудованої узагальненої динамічної матриці проаналізовано загальну схему розрахунку фононних спектрів складних кристалів в еквідистантному та нееквідистантному наближеннях. Проведено аналіз симетрії віток фононного спектру для високосиметричних точок і напрямків зони Бриллюена. Застосовано надпросторовий підхід для досліджень динаміки гратки перовськітних природних (2a□2a□4c)-надґраток. На основі побудованої узагальненої динамічної матриці складних кристалів типу BaSrTi2O6 тетрагональної сингонії проведено розрахунки модельних фононних спектрів природних (2a□2a□4c)-надґраток в еквідистантному і нееквідистантному наближеннях для ланцюга генезису структурних ускладнень: пакет D(Ba2Ti2O4) – пакет B(C) (Ba2Ti2O5) – пакет A(Ba2Ti2O6) – BaSrTi2O6. Застосовано надпросторовий підхід для досліджень динаміки ґратки систем перовськітних твердих розчинів для різних моделей заміщення у катіонних надґратках (типів (A|0.5A||0.5)(B|0.5B||0.5)O3, (A|0.5A||0.5)BO3 і A(B|0.5B||0.5)O3 (x,y=0.5)), проаналізовано загальну схему трансформації фононних віток складних систем твердих розчинів, як (4a□4a□4a)-надґраток, виходячи із гранецентрованої кубічної гратки протокристалу. Шляхом підгонки розрахункових значень частот фононних мод у точці Г(0,0,0) з експериментальними значеннями та розрахунками інших авторів визначені силові постійні міжатомної взаємодії, в зв'язку з чим, питання узгодження розрахунку з експериментом забезпечується апріорі.

2. The method of determining the complex crystal structure as (3+d)-dimensional structure in the form of motive convolution with repetition mechanism was used. The gradual complication of crystals with (2a□2a□2a)- and (2a□2a□4c)-superlattices has been considered, proceeding from the simple cubic protocrystal lattice, the Fourier components of mass defect operator matrix have been given. The principles of the dynamics theory of a crystalline lattice, also taking into account the consequences of superspace symmetry for crystals of NaCl, AuCu3 and BaTiO3 structural typeshave been considered. The general symmetry relations imposed by generalized symmetry on the description of the modulated crystals lattice dynamics have been formulated. The structures of generalized dynamic matrices of complex crystals in the traditional and superspace approaches with the consideration of amplitudes of modulation functions of mass and force disturbance have been analyzed. The lattice dynamics of BaTiO3 crystals type in the concept of superspace symmetry has been considered. On the basis of the constructed generalized dynamic matrices, the general scheme for calculating the phonon spectra of complex crystals in equidistant and non-equidistant approximations has been analyzed. The symmetry analysis of the branches of the phonon spectrum has been performed for high-symmetry points and directions of the Brillouin zone. Superspace approach has been used to study the dynamics of lattices of perovskite natural (2a□2a□4c)-superlattices. On the basis of the constructed generalized dynamic matrices of the BaSrTi2O6 type complex crystals of the tetragonal syngony the calculations of the natural (2a□2a□4c)-superlattices model phonon spectra in equidistant and non-equidistant approximations for the chain of structural complications genesis have been made: package D (Ba2Ti2O4) - package B (C) (Ba2Ti2O5) - package A (Ba2Ti2O6) - BaSrTi2O6. Superspace approach has been applied to study the lattice dynamics of perovskite solid solutions systems for different substitution models in cation superlattices (A|0.5A||0.5)(B|0.5B||0.5)O3, (A|0.5A||0.5)BO3 and A(B|0.5B||0.5)O3 (x,y=0.5) types, the general scheme of transformation of solid solutions complex systems phonon branches as (4a□4a□4a)-superlattices, proceeding from the face-centered cubic lattice of the protocrystal has been analysed. By fitting the calculated values of the phonon modes frequencies at the point Г(0,0,0) with the experimental values and calculations of other authors, the power constant of the inter-atomic interaction has been determined, in this connection, the question of reconciliation of the calculation with the experiment is provided a priori.

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. Небола Іван Іванович

2. Nebola Ivan I.

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. Гомоннай Олександр Васильович

2. Gomonnai Alexander V.

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. Мельничук Степан Васильович
2. Melnychuk Stepan V.

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 Блецкан Дмитро Іванович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Блецкан Дмитро Іванович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.