Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0826U000733

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 31-03-2026

Статус: Запланована

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. ПОПРЯГА Діана Олександрівна
2. Diana O. POPRYaHA

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-3642-1322

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: 105 Прикладна фізика та наноматеріали

Дата захисту: 26-05-2026

Спеціальність за освітою: 014 Середня освіта (фізика)

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 12475

Повне найменування юридичної особи: Державний заклад "Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського"

Код за ЄДРПОУ: 02125473

Місцезнаходження: вул. Старопортофранківська, Одеса, 65020, 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 заклад "Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського"

Код за ЄДРПОУ: 02125473

Місцезнаходження: вул. Старопортофранківська, Одеса, 65020, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.19.04

Тема дисертації:

1. Кластерно-модифіковані гетероструктури з нанокластерною підсистемою
2. Cluster-Modified Heterostructures with a Nanocluster Subsystem

Реферат:

1. В роботі досліджено випадки, що підтверджують потенційну здатність нанокластерів функціонально модифікувати властивості базового матеріалу. Вивчення, таких випадків дозволяє розробити критерії пошуку таких систем, як принципово нових типів гетеро напівпровідників – кластеризованих гетероструктур. У дисертації розкрито зміст категорії «кластерно-модифіковані матеріали», зазначені їх сутнісні характеристики. Розроблено теоретичні методи модельного дослідження атомної, електронної та фононної структур нанокластерів, що базуються та методі функціоналу електронної густини, з урахуванням градієнтного розкладу в рамках наближення локальної електронної щільності. Застосовано параметризацію з використанням емпіричних параметрів. Розроблений підхід мінімізує дослідницькі зусилля у визначенні конкретних фізико-хімічних характеристик з достатньою точністю результатів. Даний підхід уможливлює проведення досліджень динамічних процесів, використовуючи стандартну молекулярно-динамічну

процедуру. Зважаючи на переваги процедури проведення комп'ютерного моделювання динаміки атомів у нанокластерах, враховано характер перегібридизації атомних орбіталей у процесі атомних перебудов (зокрема, релаксації). Доведено, що відбувається безперервне «оновлення» потенціалу взаємодії відносно локального енергетичного мінімуму (миттєвого розташування атомів). Отримано результати для структурування квантових рівнів, розподілу електронної густини та інших фізико-хімічних характеристик нанокластерів кремнія в ізольованому стані. Нанокластерна підсистема розглядається у дослідженні як система пов'язаних між собою нанокластерних фрагментів. Доведено, що механізм формування хімічних зв'язків між нанокластерними фрагментами реалізується через молекулярні орбіталі кластерного центру. Доведено, що нанокластерна підсистема: відтворює властивості атомарних нанокластерів, дозволяє вивчити їх ознаки на перетині реальної і модельної системи; передбачає сформованість методологічної бази даних для вирішення практичних задач твердотільної електроніки; виявляє і визначає співвідношення різних механізмів утворення атомарних нанокластерів, як в ізольованому стані так і у матричному оточенні. В межах такого підходу висунуто ідею, згідно з якою кластерний центр являє собою кластерне ядро, а атоми, що класифікуються як зовнішні по відношенню до цього ядра, визначаються як поверхневі атоми кластерного центру.Доведено, що схеми інтегрування рівнянь руху при проведенні молекулярно-динамічних розрахунків відкривають можливості застосування потенціалів взаємодії між атомами і нанокластерами. Завдяки порівнянню реальних і модельних нанокластерних центрів схарактеризовано нові можливості в процесі вирішення конкретних технологічних завдань твердотільної напівпровідникової електроніки, підвищення надійності та стійкості мікроелектронних приладів і апаратури. Запропоновано теоретичні методи вивчення механізмів формування і фізико-хімічних властивостей нанокластерів кремнію. Розглянуто відхилення від планарності для нанокластерних сполук кремнію. Описано відносно високу стабільність пірамідальних кластерних центрів, що пояснюється наявністю електронних ефектів, що є характерною лише для кремнію. Виявлено наступні особливості: істотний вплив ступеня поливалентності міжатомних зв'язків у процесі стабілізації нанокластерів. Зафіксовано, що стабільність структури зростає обернено пропорційно до залежності кількості подвійних зв'язків. Оптимізація геометрії кластерів дозволила продемонструвати вплив замісників на перерозподіл електронної щільності в різних ізомерних нанокластерах. Доведено, що поведінка енергії деформації поліедричних структур (ПС) залежить від числа планарних кілець: напруга спадає, коли останніх стає більше. Енергія деформації зменшується для ПС, якщо кількість чотирьох атомних кілець (4-АК) в них зростає. Крім того, в цих ПС деякі кути між зв'язками в n-АК є близькими до «ідеальних» величин - 109,50 (характерна величина для c-Si). Енергія механічної напруги різко зростає при подальшому збільшенні числа атомів в ПС. незважаючи на збільшення числа 4-АК. Причиною такої поведінки є відхилення кутів між зв'язками в циклічних структурах (120,00 для 6-АК; 135,00 для 8-АК) в n-АК від тетраедричних значень («ідеальних» кутів - 109,50). Найменшою енергією деформації характеризується ПС, що має в перерізі п'ятиатомне кільце. Цей висновок підтверджує можливість синтезу десятиатомної ПС. Представлено методи дослідження гетеропереходу (ГП) pCu2S-nSi, який заслуговує на увагу на шляху вирішення завдань сучасної оптоелектроніки, при розробці фотовентильних елементів (ФЕ). Пропонований технологічний метод отримання гетеропереходу ґрунтується на формуванні текстурованих шарів сірчистої міді мозаїчного типу. Модифікація властивостей pCu2S-nSi-ГП реалізується за допомогою квазіметалевих нанокластерних центрів у вигляді НКП.

2. The dissertation examines cases confirming the potential ability of nanoclusters to functionally modify the properties of a base material. The study of such cases makes it possible to develop criteria for identifying such systems as fundamentally new types of heterosemiconductors – clustered heterostructures. The work reveals the content of the category «cluster-modified materials» and defines their essential characteristics. Theoretical methods for modeling the atomic, electronic, and phonon structures of nanoclusters have been developed based on the electron density functional method, taking into account gradient expansion within the framework of the local electron density approximation. Parameterization using empirical parameters has been applied. The proposed approach minimizes research efforts in determining specific physicochemical characteristics while ensuring sufficient accuracy of results. This approach enables the study of dynamic processes using standard

molecular dynamics procedures. Given the advantages of computer modeling of atomic dynamics in nanoclusters, the rehybridization of atomic orbitals during atomic rearrangements (in particular, relaxation) has been taken into account. It has been proven that there is a continuous «updating» of the interaction potential relative to the local energy minimum (instantaneous atomic configuration). Results have been obtained for the structuring of quantum levels, the distribution of electron density, and other physicochemical characteristics of silicon nanoclusters in an isolated state. The nanocluster subsystem is considered as a system of interconnected nanocluster fragments. It is shown that the mechanism of chemical bond formation between nanocluster fragments is realized through the molecular orbitals of the cluster center. It has been demonstrated that the nanocluster subsystem reproduces the properties of atomic nanoclusters, enables the study of their features at the intersection of real and model systems, provides a methodological database for solving practical problems of solid-state electronics, and reveals the relationship between different mechanisms of atomic nanocluster formation both in isolated states and in a matrix environment. Within this approach, the idea is proposed that the cluster center represents a cluster core, while atoms external to this core are defined as surface atoms of the cluster center. It is shown that integration schemes of the equations of motion in molecular dynamics calculations allow the application of interaction potentials between atoms and nanoclusters. Through comparison of real and model nanocluster centers, new possibilities for solving technological problems in solid-state semiconductor electronics, as well as improving the reliability and stability of microelectronic devices, have been identified. Theoretical methods for studying the formation mechanisms and physicochemical properties of silicon nanoclusters are proposed. Deviations from planarity in silicon nanocluster compounds are analyzed.A relatively high stability of pyramidal cluster centers is described, explained by specific electronic effects characteristic of silicon. The following features have been identified: a significant influence of the degree of polyvalency of interatomic bonds on nanocluster stabilization. It has been established that structural stability increases inversely with the number of double bonds. Optimization of cluster geometry has demonstrated the influence of substituents on the redistribution of electron density in various isomeric nanoclusters. It has been shown that the deformation energy of polyhedral structures (PS) depends on the number of planar rings: mechanical stress decreases as their number increases. The deformation energy decreases for polyhedral structures (PS) with an increasing number of four-atom rings. In such PS, certain bond angles n-AC approach the «ideal» value of 109.5° (typical for c-Si). However, further increase in the number of atoms leads to a sharp rise in mechanical stress due to deviations of bond angles in cyclic structures (120° for 6-AC and 135° for 8-AC) in n-AK from tetrahedral values. The lowest deformation energy is characteristic of structures containing five-membered rings in cross-section, confirming the possibility of synthesizing ten-atom PS. Methods for studying the heterojunction pCu□S–nSi are presented, which are promising for solving problems in modern optoelectronics, particularly in the development of photovoltaic elements (PhE). The proposed technological method is based on the formation of mosaic-type textured copper sulfide layers. Modification of the properties of the pCu□S–nSi heterojunction is achieved using quasi-metallic nanocluster centers (NCC).

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Не застосовується

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- 1. Д. О. Попряга, В. В. Ковальчук. Формування нанокластерної підсистеми плівкового гетеропереходу Sensor Electronics and Microsystem Technologies 2025 – Т. 22, № 3 С. 58-65. URL: http://semst.onu.edu.ua/article/view/339805/328770 DOI: https://doi.org/10.18524/1815-7459.2025.3.339805
- 2. Д. О. Попряга, В. В. Ковальчук. Dipole moments of a nanoclaster subsystem ISSN 2616-8685. JOURNAL OF PHYSICS AND ELECTRONICS Vol. 33(1-2), 2025. C.41-49. URL:

https://jphe.dnu.dp.ua/index.php/jphenew/article/view/207 DOI: https://doi.org/10.15421/332505

- 3. Д. О. Попряга, Д. О. Дячок, В. В. Ковальчук, Д. О. Корчевський. Методи формування матричного оточення нанокластерів у випадку біологічних об'єктів. ISNN 3041-2269. Acta Carphathica. №2 С.106-114. URL: https://journals.dspu.in.ua/index.php/actacarpathica/article/view/659 DOI: https://doi.org/10.32782/2450-8640.2025.2.11
- 4. Д. О. Попряга, Д. О. Дячок, В. В. Ковальчук. Плівковий гетероперехід з нанокластерною підсистемою для фотоелементів нового типу. ISNN 3083-6549 . Technology and design in electronic equipment. №3-4 С. 9-14. URL: https://tkea.com.ua/index.php/journal/issue/view/TKEA2025.3-4 DOI: https://doi.org/10.15222/TKEA2025.3-4
- 1. Popriaha D., Kovalchuk V. Optical Properties of the Semiconductor Nanoclusters. Technium (2025): Romanian Journal of Applied Sciences and Technology, 28, P.35–42. URL: https://techniumscience.com/index.php/technium/article/view/12625 DOI: https://doi.org/10.47577/technium.v28i.12625
- 1. Попряга Д. О., Ковальчук В. В. Нанокластерна підсистема, як складова твердотільного гетеропереходу Modern Science, Economy and Digital Innovation The 2nd International scientific and practical conference " Modern Science, Economy and Digital Innovation " March 12-14, 2025, Bucharest, Romania. 2025. С. 203-205.
- 2. Попряга Д. О. Дослідження властивостей матеріалів і речовини з використанням нанокластерного підходу Scientific Forum:Theory and practice of research: Proceedingsof the IIIV International Scientific and Theoretical Conference (March 21, 2025) San Francisco, USA. Scientia. 2025. С. 115-119.

Наукова (науково-технічна) продукція: технології

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впроваджено

Зв'язок з науковими темами: 0112U006443

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ковальчук Володимир Володимирович

2. Volodymyr V. Kovalchuk

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-7460-809

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Державний заклад "Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського"

Код за ЄДРПОУ: 02125473

Місцезнаходження: вул. Старопортофранківська, Одеса, 65020, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дячок Дмитро Олександрович

2. Dmytro O. Diachok

Кваліфікація: к. ф.-м. н., доц., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-3924-4416

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Державний заклад "Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського"

Код за ЄДРПОУ: 02125473

Місцезнаходження: вул. Старопортофранківська, Одеса, 65020, 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. Ніцук Юрій Андрійович

2. Yurii A. Nitsuk

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-7207-3688

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Національний університет "Одеська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 43861328

Місцезнаходження: пр. Шевченка, Одеса, 65044, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Балабай Руслана Михайлівна

2. Ruslana M. Balabai

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-2618-7796

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Криворізький державний педагогічний університет

Код за ЄДРПОУ: 40787802

Місцезнаходження: проспект Гагаріна, Кривий Ріг, Криворізький р-н., 50086, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Соловйов Володимир Миколайович
2. Volodymyr M. Soloviov

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-4945-202X

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Державний заклад "Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського"

Код за ЄДРПОУ: 02125473

Місцезнаходження: вул. Старопортофранківська, Одеса, 65020, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дончев Іван Іванович
2. Ivan I. Donchev

Кваліфікація: к. т. н., доц., 05.27.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-3373-6562

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Державний заклад "Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського"

Код за ЄДРПОУ: 02125473

Місцезнаходження: вул. Старопортофранківська, Одеса, 65020, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Ків Арнольд Юхимович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Ків Арнольд Юхимович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Княжева І. А.
Реєстратор	Юрченко Тетяна Анатоліївна
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна