Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U003113

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-06-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Штейфан Алексина Ярославівна
2. Steyfan Aleksyna Yaroslavivna

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: 06-06-2019

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: 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

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. Опис стабільності кристалічної структури складних кристалів та модельні розрахунки дисперсії їх фононних спектрів

2. Description of stability of the crystal structures of the complex crystals and model calculations of the dispersions of their phonon spectra

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню параметрів стійкості кристалічної структури в рамках моделі зв’язкової валентності (МЗВ), а також модельним розрахункам дисперсії фононів: суперіоніка Cu6PS5Br, сапфіру (корунду) α-Al2O3, квазіфулеритів C30 і C42, піроxлорів з стехіометрією A2B2X6Y та борних ангідридів B2O3. Вперше розроблено дві розрахункові схеми на базі МЗВ для прогнозування ідеальних оксидних піроxлорних структур типу A2B2X6Y. Проаналізовані на кристалічну стійкість структури були покладені в основу побудови моделей для розрахунку їх одночастинкових спектрів. Розрахунок дисперсійних залежностей фононів цих структур проводився в концепції надпросторової симетрії, яка використовувалась для побудови їх (3+d)-мірних моделей, базуючись на метриці протокристалу, яка ускладнювалася збудженнями різного типу. На першому етапі визначалося масове збурення, яке забезпечує

адекватний розподіл масових характеристик; при цьому утворене силове поле міжатомної взаємодії задавалося залежним тільки від віддалі – r0. Опис моделей всіх структур зводився до побудови сукупностей векторів модуляції, визначення масових модуляційних функції, формування узагальненої динамічної матриці, як суперпозиції динамічних матриць одноатомних структур, а власні значення дисперсійних залежностей одночастинкових збурень отримані на високосиметричних напрямках зони Бріллюена. Розроблене програмне забезпечення дозволило розрахувати фононні спектри для розглядуваних кристалів. Для всіх досліджуваних структур одержано розклад коливного зображення на незвідні зображення в точці Г зони Бріллюена. Для кристалів суперіоніка Cu6PS5Br було проведено ab initio розрахунки електронних спектрів різних модельних структур.

2. The thesis is devoted to the investigation of the stability parameters of the crystal structures within the framework of the bond valence model (BVM), and also to the model calculations of the dispersions of the phonons for the superionic materials Cu6PS5Br, sapphire □-Al2O3, quasi-fullerites C30 and C42, pyrochlores of the A2B2X6Y stoichiometry, and boric anhydrides B2O3. For the first time, the two BVM-based calculation schemes have been developed for predicting the structures of the ideal A2B2X6Y oxide pyrochlores. The structures examined for stability were then used as a basis for the models in calculations of their single-particle spectra. The calculations of the dispersion dependences of phonons of these structures were carried out within the framework of the superspace symmetry concept which has been used for building of their (3+d)-dimension models, based on the protocrystal metrics complicated by perturbations of different types. As a first step, the mass perturbation has been determined, providing the adequate distribution of the mass parameters; the obtained force field of interatomic interaction was taken to be dependent solely on the distance r0. The description of the models of all the structures was reduced to the construction of the proper sets of modulation vectors, the definition of the mass modulation function, the construction of the generalized dynamic matrix taken as the superposition of the dynamic matrixes of single-atom structures; the eigenvalues of the dispersion dependences of the single-particle perturbations were obtained for the high-symmetry directions of the Brillouin zone. The developed software allowed one to calculate the phonon spectra for the considered crystals. For all the investigated structures, the vibrational representations have been decomposed into the irreducible representations at the □ point of the Brillouin zone. For the superionic Cu6PS5Br crystals, ab initio calculations of electronic spectra of different model structures have been performed.

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 Ivanovych

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. Рубіш Василь Михайлович

2. Rubish Vasyl Mykhailovych

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Маслюк Володимир Трохимович

2. Maslyuk Volodymyr Trokhymovych

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.