Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U003073

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-06-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бовгира Ростислав Вікторович
2. Bovhyra Rostyslav Viktorovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.18

Назва наукової спеціальності: Фізика і хімія поверхні

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 14-06-2019

Спеціальність за освітою: Фізика твердого тіла

Місце роботи здобувача: Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534430

Місцезнаходження: Наукова, 3б, м. Львів, Львівська обл., 79060, 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 20.051.06

Повне найменування юридичної особи: Коломийський навчально-науковий інститут ДВНЗ "Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника"

Код за ЄДРПОУ: 25735101

Місцезнаходження: вул. Лисенка, 8, м. Коломия, Коломийський р-н., Івано-Франківська обл., 78200, 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: Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534430

Місцезнаходження: Наукова, 3б, м. Львів, Львівська обл., 79060, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик:

Тема дисертації:

1. Структура й електронні властивості наноструктур на основі оксиду цинку.
2. Structure and electronic properties of zinc oxide nanostructures.

Реферат:

1. Робота присвячена комплексному теоретико-експериментальному дослі¬дженню структурних, електронних, люмінесцентних і сенсорних властивостей наноструктур на основі ZnO (нанокластерів, нанотрубок, нанопорошків).У межах теорії функціонала електронної густини проведено моделювання структури і параметрів енергетичного спектра нанокластерів ZnO. Встановлено характер взаємодії нанокластерів ZnO із молекулами різних газів в умовах обміну електронами між адсорбатами і поверхнею кластерів. Проаналізовано вплив домішок 3d металів на електронну структуру нанокластерів і нанотрубок ZnO. Одержані значення енергій формування дефектів, ширини енергетичної щілини і парціальних густин станів, встановлено вплив дефектів на електронний спектр нанокластерів ZnO.Вивчено люмінесцентні властивості нанопорошків ZnO як чистих так і легованих атомами 3d металів та встановлено вплив

лазерного поверхневого легування атомами Ag, Au, Pt на адсорбційну здатність ZnO. Виявлені закономірності формування адсорбційних поверхневих електронних станів у нанопорошках при адсорбції газів. Проаналізовано характер зміни електронних властивостей нанопорошкових металооксидів (адсорбційна здатність, швидкодія, чутливість, селективність) при адсорбції газів, вибрано конструкцію та оптимальні матеріали для побудови реєструючої багатокомпонентної газосенсорної системи.

2. The work is dedicated to the complex theoretical and experimental study of structural, electronic, luminescent and gas-sensing properties of nanostructures based on ZnO (nanoclusters, nanotubes, nanopowders).Density functional theory studies of structural and electronic properties of small clusters were performed. For each cluster an optimization of structure was performed and the basic properties of the electronic structure were established. It was determined that with the increasing of the formula unit number energetically more efficient in the small clusters is stabilization from the ring to fulleren-like structures containing tetragonal and hexagonal faces. Among the clusters (ZnO)12 doped with 3d transition metal atoms the most stable are clusters with Zn substitution. HOMO-LUMO band gap of doped clusters decreases due to p-d hybridization of the impurity atom orbitals with the orbitals of the oxygen atoms. First principles calculations of the adsorption of molecules of different gases (O2, H2O, CO, NO2, NH3, CH3OH, C3H6O and C2H5OH) on the surface of nanoclusters Zn12O12 were performed. It was determined that the molecules of H2O, CO, NO2, NH3, CH3OH, C3H6O and C2H5OH increase the concentration of the main charge carriers (electrons) in sensor systems, whereas molecule O2, reduce their concentration. Adsorption of molecules causes the reduction of the band gap of nanoclusters. The sharpest decrease is observed for O2 molecules, and among donor molecules the greatest impact was observed with CO and NH3 molecules. DFT studies of the structural and electronic properties of nanoclusters (ZnO)n (n = 34, 60) in different geometric configurations were conducted. It was established that for the (ZnO)34 nanoclusters, the most stable are fullerene-like hollow structures that satisfy the rule of six isolated quadrangles. For the (ZnO)60 nanoclusters, different types of isomers, including hollow structures and sodalite-like structures composed from (ZnO)12 nanoclusters, were investigated. It was determined that the most energetically favorable structure was sodalite-type structure composed of seven (ZnO)12 clusters.First principle investigations of native point defects in (ZnO)n nanoclusters (n = 34, 60) based on DFT+U approach, for di□erent types of isomers, were performed. The values for formation energy, HOMO–LUMO gap, as well as the partial density of states for each cluster were investigated to establish the influence of the defects on the electronic properties of the (ZnO)n nanoclusters. It was determined that the most favorable defects of the clusters structure were Zn and O vacancies.

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. Попович Дмитро Іванович

2. Popovych Dmytro I.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.18

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. Білинський Ігор Васильович

2. Bilynskyi Ihor Vasylovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.01.01

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. Галій Павло Васильович

2. Halii Pavlo Vasylovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.18

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	Остафійчук Богдан Костянтинович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Остафійчук Богдан Костянтинович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

Юрченко Т.А.