Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U004809

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-11-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Найдич Богданна Петрівна
2. Naidych Bohdanna P.

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: 19-10-2019

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: ДВНЗ "Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника"

Код за ЄДРПОУ: 02125266

Місцезнаходження: вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, Івано-Франківська обл., 76018, 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 20.051.06

Повне найменування юридичної особи: Коломийський 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: ДВНЗ "Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника"

Код за ЄДРПОУ: 02125266

Місцезнаходження: вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, Івано-Франківська обл., 76018, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.01, 31.01

Тема дисертації:

1. Кристалічна структура та термодинамічні параметри тонкоплівкових конденсатів систем II-VI, IV-VI.

2. Crystal structure and thermodynamic parameters of the thin-film condensates for II-VI, IV-VI systems.

Реферат/анотація:

1. У дисертаційній роботі запропоновано принципи побудови моделей кластерів напівпровідникових сполук типу IV-VI, II-VI та твердих розчинів на основі системи Pb-Cd-Te з метою аналізу наступного впливу поверхні на структурні та термодинамічні характеристики матеріалу. Для широкого температурного інтервалу (20-1000) К на основі методу функціоналу густини розраховано енергію ΔE, ентальпію ΔH, вільну енергію Гіббса ΔG, ентропію ΔS кубічних фаз сполук IV-VI (PbS, PbSe, PbTe і Pb0,9Cd0,1Te) та сфалеритних фаз сполук II-VI (CdS, CdSe, CdTe). Із врахуванням переважаючих напрямків росту тонких плівок Pb0,9Cd0,1Te і, базуючись на даних Х-променевого структурного аналізу, запропоновано моделі кластерів та виконану відповідну реконструкцію поверхні. Показано, що навколо атому кадмію виникає область підвищеного градієнта електронної густини.Визначено відношення внеску внутрішніх атомів до сумарної

кількості атомів побудованих кластерів при аналізі густини електронних станів. Аргументовано величини мінімальних граничних розмірів кластерів для виконання розрахунків з перших принципів та правильного опису характеристик матеріалу, що спричинює скорочення часу виконуваних розрахунків.

2. The principles of constructing of the adequate models for clusters of IV-VI, II-VI semiconductor compounds and solid solutions based on the Pb-Cd-Te system in order to analyze the subsequent influence of the surface on the structural and thermodynamic characteristics of such materials were proposes in dissertation. The energy ΔE, enthalpy ΔH, Gibbs free energy ΔG, and entropy ΔS for the cubic phases of IV-VI compounds (PbS, PbSe, PbTe and Pb0.9Cd0.1Te) and sphalerite phases for the II-VI compounds (CdS, CdSe, CdTe) were calculated on the basis of the density functional method for wide temperature range (20-1000) K. Taking into account the prevailing directions of growth of Pb0,9Cd0,1Te thin films, the cluster models were proposed based on X-ray analysis data, and the corresponding surface reconstruction was performed. It was shown that an area of high electron density gradient arises around the cadmium atom, which gives rise the clearly express of ionic bonds.The electronic density distribution maps for the developed cluster models were constructed and its redistribution was established due to the formation of chemical bonds on the cluster surface.The temperature dependences of isochoric Cv and isobaric Cp molar capacities were investigated on the basis of comparison of values of experimental measurements and ab initio calculations.The relation of the contribution of internal atoms to the total number of atoms in the built clusters in the analysis of the electron density of states is determined. The increase of the contribution of surface atoms to the formation of electron-electron density with increasing the spatial dimensions of the cluster was shown. The key role of surface states for determining for the values of thermodynamic and energy characteristics of the studied semiconductor binary and ternary systems and the contribution of cadmium inclusions to the Pb-Cd-Te solid solution in the conduction band and valence band.The values of the minimum sizes of clusters for performing the calculations from the first principles and the correct description of the material characteristics.

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. Никируй Любомир Іванович

2. Nykyrui Liubomyr I.

Кваліфікація: к. 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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Галій Павло Васильович
2. Halii Pavlo V.

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Рубіш Василь Михайлович
2. Rubish Vasyl M.

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. Мазур Мирослав Павлович
2. Mazur Myroslav P.

Кваліфікація: к. 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 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.