

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0411U004191

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-07-2011

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Житлукхіна Олена Сергіївна

2. Zhitlukhina Olena Sergijivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.07

Назва наукової спеціальності: Фізика твердого тіла

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 16-06-2011

Спеціальність за освітою: 7.070101

Місце роботи здобувача: Донецький фізико-технічний інститут ім. О.О. Галкіна НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05420497

Місцезнаходження: 03680 Київ пр.Науки, 46

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 11.184.01

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію**

**Повне найменування юридичної особи:** Донецький фізико-технічний інститут ім. О.О. Галкіна НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05420497

**Місцезнаходження:** 03680 Київ пр.Науки, 46

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 29.19.15

**Тема дисертації:**

1. Еволюція спінових станів 3d іонів в комплексах з різною симетрією
2. The spin-state evolution of 3d ions in complexes of different symmetry

**Реферат:**

1. Дисертація присвячена дослідженню еволюції спінового стану 3d металів у комплексах різної природи та симетрії з урахуванням різних видів спотворень комплексу. Для розрахунків було застосовано нову параметризацію теоретичного метода кристалічного поля. Запропонована схема побудови спінових діаграм, які являють собою поверхню середнього квадрата повного спіну іона металу на площині параметрів "ефективний заряд ядра іона металу - спотворення координаційного комплексу" або на площині двох типів спотворень при заданому значенні ефективного заряду, дозволила дослідити еволюцію спінових станів під впливом зовнішніх полів та тисків, а також при наявності довільного спотворення оточення металевго іону, яке має місце у реальних кристалах. Обрана методологія розрахунків дала можливість адекватно інтерпретувати спектри електронного парамагнітного резонансу іонів хрому в сполуці Hg<sub>1-x</sub>Cr<sub>x</sub>Se та іона міді в нормальній шпінелі ZnAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>. Виявлено взаємозв'язок між структурою спектра ЕПР іонів хрому в сполуці Hg<sub>1-x</sub>Cr<sub>x</sub>Se та тригональними спотвореннями локального оточення іона хрому. Вперше встановлено

взаємозв'язок між ступенем тригональних спотворень кисневого октаедру в шпінелі  $ZnAl_2O_4$ , що містить двовалентну мідь, та глибиною мінімуму адіабатичного потенціалу.

2. The thesis is devoted to a study of the evolution of spin states of 3d metals in complexes of different nature and symmetry, due to different kinds of complex distortions. A new parameterization of the crystal field theory has been applied for the calculations. A scheme for constructing spin-state diagrams representing the surface mean square total spin of metal ions on the plane parameters "effective nuclear charge of a metal ion - distortion of the coordination complex" or in the plane of two types of distortion at a given value of the effective charge has been proposed. It allowed to study the evolution of spin states under the influence of external fields and pressures, as well as in the presence of random distortions surrounding the metal ion, which takes place in real crystals. The selected calculation methodology made it possible to interpret adequately spectra of the electron paramagnetic resonance of a chromium ions in the compound  $Hg_{1-x}Cr_xSe$  and a copper ion in a normal spinel  $ZnAl_2O_4$ . The dependence between the structure of ESR spectra of chromium ions in the compound  $Hg_{1-x}Cr_xSe$  and trigonal distortions of the local environment of a chromium ion has been revealed. The relationship between the degree of trigonal distortions of an oxygen octahedra in spinel  $ZnAl_2O_4$  containing a bivalent copper ion, and a minimum depth of adiabatic potential was established for the first time.

**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 ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Ламонова Карина Валентинівна

2. Lamonova Karyna Valentynivna

**Кваліфікація:** к.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. Андерс Олександр Георгійович

2. Андерс Олександр Георгійович

**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. Левченко Георгій Георгійович

2. Левченко Георгій Георгійович

**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

**Рецензенти**

## **VIII. Заключні відомості**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
голови ради**

Варюхін Віктор Миколайович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні**

Варюхін Віктор Миколайович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності**



Юрченко Т.А.