Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U002921

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-06-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шевцова Тетяна Миколаївна

2. Shevtsova Tetiana M.

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: 28-05-2019

Спеціальність за освітою: Педагогіка і методика середньої освіти. Фізика

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

Код за ЄДРПОУ: 05420497

Місцезнаходження: проспект Науки, 46, м. Київ, Київ, 03028, 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 64.175.03

Повне найменування юридичної особи: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, 47, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61103, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

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

Код за ЄДРПОУ: 05420497

Місцезнаходження: проспект Науки, 46, м. Київ, Київ, 03028, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.29, 29.19.39, 29.19.43

Тема дисертації:

1. Динаміка гратки та електронна структура низьковимірних провідних систем на основі заліза

2. Lattice dynamics and electronic structure of low-dimensional conducting iron-based systems

Реферат/анотація:

1. Для отримання електронної структури та фононних частот були проведені самоузгоджені розрахунки у межах теорії функціонала густини повнопотенціальним методом приєднаних плоских хвиль і методом псевдопотенціалу. В результаті, для халькогенідів заліза FeTe, FeSe та Rb2Fe4Se5 стало можливим дослідити вплив магнітного моменту іона заліза та його спінового стану на фононну підсистему цих сполук. Виявлено аномальне пом'якшення високочастотних фононів при збільшенні магнітного моменту заліза і висока чутливість B1g(Fe) фонону до спінового стану іона заліза. Показано, що зміна спінового стану є можливою причиною виявленого експериментально аномально великого посилення цієї фононного моди в FeSe. У фазово сепарованому Rb0.8+xFe1.6+ySe2 отримані частоти фононів у різних фазах, а також встановлено можливість існування вакансійно впорядкованої провідної фази Rb2Fe4Se5 як роздільника між непровідною магнітною фазою Rb2Fe4Se5 та надпровідною RbпFe2Se2 немагнітною фазою. Для систем, що складаються з

вуглецевих нанотрубок та нанодротів заліза розрахована стабільність структури залежно від геометричних параметрів, а також магнітні та провідні властивості для різних варіантів впорядкування заліза всередині нанотрубок.

2. The thesis is devoted studying of lattice dynamics and electronic structure of iron superconductors and narrow carbon nanotubes contained iron chains. Self-consistent calculations were carried out within the framework of the theory of functional density using the full potential linear augmented plane wave method and the pseudopotential one to obtain the electronic structure and phonon frequencies of the objects under study. As a result, an impact of the iron magnetic moment and its spin state on the phonon subsystem of the FeTe, FeSe, and Rb2Fe4Se5 iron chalcogenides was investigated. Anomalous softening of high-frequency phonons under increasing magnetic moment of iron as well as high sensitivity of the vibrational B1g(Fe) mode to the change of the iron spin state were found. It was shown that a change in the iron spin state is one of the reasons for the anomalously large hardening of the B1g(Fe) phonon mode in FeSe observed experimentally. For the phase-separated Rb0.8+xFe1.6+ySe2 compound, the phonon frequencies were obtained in the different phases. Ab-initio spin-polarized band structure calculations showed that the compressed vacancy ordered Rb2Fe4Se5 phase can be conductive one and, therefore, it may serve as a protective interface spacer between the purely metallic Rb□Fe2Se2 phase and the insulating Rb2Fe4Se5 phase providing percolative Josephson-junction like superconductivity all throughout of Rb0.8+xFe1.6+ySe2. The structural stability, as well as the magnetic and conducting properties of the composites designed from carbon nanotubes and iron nanowires, were tested depending on the geometric parameters and different arrangement of iron ions in the nanotubes.

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. Пашкевич Юрій Георгійович

2. Pashkevich Yurii G.

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. Гречнєв Геннадій Євгенович
2. Grechnev Gennadiy E.

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. Філь Дмитро Вячеславович
2. Fil Dmytro V.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02, 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	Найдюк Юрій Георгійович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Найдюк Юрій Георгійович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.