

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0419U003630

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 19-07-2019

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Серик Микола Миколайович

2. Sieryk Mykola

**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:** 27-06-2019

**Спеціальність за освітою:** Радіофізика і електроніка

**Місце роботи здобувача:** Інститут фізики напівпровідників імені В.Є.Лашкарьова НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05416952

**Місцезнаходження:** пр. Науки, 41, м. Київ, Київська обл., 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 26.199.02

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут фізики напівпровідників імені В.Є.Лашкарьова  
НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05416952

**Місцезнаходження:** пр. Науки, 41, м. Київ, Київська обл., 03028, 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:** Інститут фізики напівпровідників імені В.Є.Лашкарьова  
НАН України

**Код за ЄДРПОУ:** 05416952

**Місцезнаходження:** пр. Науки, 41, м. Київ, Київська обл., 03028, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 29.19.31

**Тема дисертації:**

1. Процеси молекулярної організації в напівпровідникових плівках на основі монометинових, мероціанінових та скварилієвих барвників
2. Processes of molecular organization in semiconductor films on the monomethyne, merocyanine and squaraine dyes

**Реферат:**

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню закономірностей молекулярної організації спряжених сполук поліметинового типу у твердому стані за допомогою співставлення даних оптичної спектроскопії та моделювання, визначення структури молекулярних агрегатів в залежності від хімічної структури молекули, природи підкладки та інших факторів, таких як температура підкладки, товщина плівки, а також дослідження можливості керованого формування молекулярних шарів вибраних органічних сполук. В рамках дисертаційної роботи було розроблено технічне рішення осадження тонких плівок органічних сполук поліметинового типу слабкої температурної стійкості для уникнення їх розкладу в процесі утворення плівки. Були досліджені спектральні властивості ультратонких плівок сполук в процесі їх формування,

проаналізовано спектральні особливості молекулярних комплексів, умови виникнення та розвиток агрегації молекул. Виконані квантово-хімічні розрахунки геометрії окремої молекули а також енергій електронних переходів, визначено енергію їх утворення. Проведено моделювання процесів фізсорбції сполук на підкладки різних типів, визначено принцип формування молекулярних шарів, енергію їх взаємодії з поверхнею. Встановлено можливість керованого формування молекулярних шарів в процесі створення плівок за допомогою температури підкладок. Методами квантово-хімічного аналізу розраховано залежність конформації молекул вибраних сполук та структури їх молекулярних димерів залежно від хімічного складу, оточення та умов формування плівки. Показано, що конформація молекули може залежати від взаємодії з підкладкою та міжмолекулярною взаємодією в агрегаті. Виявлено, що величина дипольного моменту для даного типу сполук є визначальним фактором у формуванні структури агрегату. Роль інших факторів у формуванні та перебудови структури агрегату, таких як температура та природа підкладки, зменшується зі збільшенням дипольного моменту молекули.

2. Thesis is devoted to the study of the regularities of the molecular organization of conjugated polymethine type compounds in solid state by comparing data of optical spectroscopy and simulation, determining the structure of molecular aggregates depending on the chemical structure of the molecule, the nature of the substrate, and other factors such as the substrate temperature, film thickness, and the possibility of controlled formation of molecular layers of the selected organic compounds. In the framework of the thesis, a technical solution was developed for depositing thin films of organic compounds of polymethine type of weak temperature resistance to avoid their decomposition during the formation of a film. The spectral properties of ultrathin films of compounds in the process of their formation were investigated, spectral features of molecular complexes, conditions of origin and development of aggregation of molecules were analyzed. Quantum-chemical calculations of the molecular geometry of individual molecules as well as the energies of electronic transitions are performed, the energy of their formation is determined. The simulation of the processes of adsorption of compounds on substrates of different types was carried out, the principle of formation of molecular layers, the energy of their interaction with the surface was determined. The possibility of controlled formation of molecular layers in the process of film deposition via temperature changes of substrates is established. The methods of quantum-chemical analysis have shown the dependence of the conformation of the molecules of the selected compounds and the structure of their molecular dimers, depending on the chemical composition, environment and conditions of the film formation. It is shown that the conformation of a molecule may depend on interaction with the substrate and intermolecular interaction in the aggregate. It was found that the magnitude of the dipole moment for this type of compounds is the determining factor in the formation of the structure of the aggregate. The role of other factors in the formation and rearrangement of the structure of the aggregate, such as the temperature and nature of the substrate, decreases with increasing dipole moment of the molecule.

**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. Дімітрієв Олег Петрович
2. Dimitriev Oleg

**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. Карбівський Володимир Леонідович
2. Karbivskyy Volodymyr

**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. Давиденко Микола Олександрович
2. Davidenko Mykola

**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**

Кочелап В'ячеслав Олександрович

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

Валах Михайло Якович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.