

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0416U003674

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 12-07-2016

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Денисюк Наталія Михайлівна

2. Denysyuk Nataliya Myhaylivna

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: 29-06-2016

Спеціальність за освітою: 8.070101

Місце роботи здобувача: Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: 03680, м. Київ -142, вул. Кржижановського, 3

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 26.207.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Кржижановського, 3, м. Київ, Київська обл., 03142, 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 проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: 03680, м. Київ -142, вул. Кржижановського, 3

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19

Тема дисертації:

1. Електронна структура і оптичні властивості сполук APb_2X_5 і Tl_3PbX_5 (A= K, Rb, Tl; X= Cl, Br, I) – перспективних матеріалів нелінійної оптики.

2. Electronic structure and optical properties of APb_2X_5 and Tl_3PbX_5 (A = K, Rb, Tl; X = Cl, Br, I) compounds, prospective materials for non-linear optics

Реферат:

1. Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла. – Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України, Київ, 2016. У дисертаційній роботі досліджено електронну структуру і оптичні властивості низки галогенідів типу APb_2X_5 і Tl_3PbX_5 (A= Tl, K, Rb; X = Cl, Br, I) – надзвичайно перспективних матеріалів нелінійної оптики. Зокрема, на основі "першопринципних" зонних розрахунків, котрі ґрунтуються на теорії функціональної щільності (density functional theory, DFT) були отримані повні і парціальні щільності станів складових атомів сполук APb_2X_5 та Tl_3PbX_5 і встановлено, що досліджувані галогеніди – непрямоzonні напівпровідники. Результати проведених зонних розрахунків дають змогу стверджувати, що основний внесок у валентну зону (переважно

у її верхню та центральну частини) сполук TlPb_2X_5 і Tl_3PbX_5 здійснюють валентні Хр-стани, в той час як дно та нижня частина валентної зони формуються переважно за рахунок внесків $\text{Pb}6s$ - і $\text{Tl}6s$ -станів. Дно зони провідності сполук TlPb_2X_5 і Tl_3PbX_5 формується, головним чином, за рахунок незаповнених $\text{Pb}6p$ -станів із суттєвим внеском також Хр-станів. У роботі досліджено рентгенівські фотоелектронні спектри внутрішніх та валентних електронів галогенідів APb_2X_5 і Tl_3PbX_5 , а також рентгенівські емісійні смуги, які відображають енергетичний розподіл $\text{Br}4p$ і $\text{K}4s$ -станів. Результати рентгенівської фотоелектронної спектроскопії свідчать про низьку гігроскопічність та високу хімічну стійкість поверхні монокристалів APb_2X_5 і Tl_3PbX_5 .

2. Thesis for the candidate degree in physics and mathematics according in specialty 01.04.07 - solid state physics. - Frantsevich Institute for the Problem of Materials Science of NASU, Kyiv, 2016. Studies of the electronic structure and optical properties of the APb_2X_5 and Tl_3PbX_5 ($A = \text{Tl}, \text{K}, \text{Rb}$; $X = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}$) halides, prospective materials for non-linear optics, have been made in the thesis. In particular, based on density functional theory (DFT), the calculations have been performed using the full potential linearized augmented plane wave (FP-LAPW) and augmented plane wave -local orbitals (APW-LO) methods in order to obtain total and partial densities of states of the atoms constituting the APb_2X_5 and Tl_3PbX_5 compounds. The calculations indicate that the investigated halides are indirect-gap semiconductors and the X p-like states are the principal contributors to the valence band (in its upper and central parts) of the TlPb_2X_5 and Tl_3PbX_5 compounds. The bottom of the valence band is formed mainly from contributions of the Pb 6s- and Tl 6s-states while the unoccupied states Pb 6p-states are the principal contributors to the bottom of the conduction band of the TlPb_2X_5 і Tl_3PbX_5 compounds, with significant contributions of the X p*-states as well. In the present thesis the X-ray photoelectron core-level and valence-band spectra of the APb_2X_5 and Tl_3PbX_5 halides have been measured as well as the X-ray emission bands representing the energy distributions of the Br 4p- and K 4s states has been recorded for the $\text{K}2\text{Pb}_2\text{Br}_5$ and $\text{Rb}_2\text{Pb}_2\text{Br}_5$ bromides. The XPS results indicate the low hygroscopicity and high chemical stability of the APb_2X_5 і Tl_3PbX_5 surfaces.

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. Хижун Олег Юліанович

2. Kyzhun Oleh Yulianovich

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. Карбівський Володимир Леонідович
2. Карбівський Володимир Леонідович

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. Юхисчук Володимир Олександрович
2. Юхисчук Володимир Олександрович

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

Фірстов Сергій Олексійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні

Фірстов Сергій Олексійович

Відповідальний за підготовку
облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності



Юрченко Т.А.