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 APb2X5 і Tl3PbX5 (A= K, Rb, Tl; X= Cl, Br, I) - перспективних матеріалів нелінійної оптики.

2. Electronic structure and optical properties of APb2X5 and Tl3PbX5 (A = K, Rb, Tl; X = Cl, Br, I) compounds, prospective materials for non-linear optics

Реферат/анотація:

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 електрону структуру і оптичні властивості низки галогенідів типу APb2X5 і Tl3PbX5 (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 APb2X5 та Tl3PbX5 і встановлено, що досліджувані галогеніди - непрямозонні напівпровідники. Результати проведених зонних розрахунків дають змогу стверджувати, що основний внесок у валентну зону (переважно

у її верхню та центральну частини) сполук TlPb2X5 і Tl3PbX5 здійснюють валентні Xp-стани, в той час як дно та нижня частина валентної зони формуються переважно за рахунок внесків Pb6s- і Tl6s-станів. Дно зони провідності сполук TlPb2X5 і Tl3PbX5 формується, головним чином, за рахунок незаповнених Pb6p-станів із суттєвим внеском також Xp-станів. У роботі досліджено рентгенівські фотоелектронні спектри внутрішніх та валентних електронів галогенідів APb2X5 і Tl3PbX5, а також рентгенівські емісійні смуги, які відображають енергетичний розподіл Br4p і K4s-станів. Результати рентгенівської фотоелектронної спектроскопії свідчать про низьку гігроскопічність та високу хімічну стійкість поверхні монокристалів APb2X5 і Tl3PbX5.

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 APb2X5 and Tl3PbX5 (A = Tl, K, Rb; X = Cl, Br, 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 APb2X5 and Tl3PbX5 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 TlPb2X5 and Tl3PbX5 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 TlPb2X5 i Tl3PbX5 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 APb2X5 and Tl3PbX5 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 KPb2Br5 and RbPb2Br5 bromides. The XPS results indicate the low hygroscopicity and high chemical stability of the APb2X5 i Tl3PbX5 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 ОПІВ:

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.