Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U005508

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-12-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Савка Степан Степанович
2. Savka Stepan Stepanovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.18

Назва наукової спеціальності: Фізика і хімія поверхні

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 12-12-2019

Спеціальність за освітою: Радіофізика і електроніка

Місце роботи здобувача: Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534430

Місцезнаходження: Наукова, 3б, м. Львів, Львівська обл., 79060, 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 20.051.06

Повне найменування юридичної особи: Коломийський інститут ДВНЗ "Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника"

Код за ЄДРПОУ: 25735101

Місцезнаходження: вул. Лисенка, 8, м. Коломия, Коломийський р-н., Івано-Франківська обл., 78200, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534430

Місцезнаходження: Наукова, 3б, м. Львів, Львівська обл., 79060, Україна

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. Ріст, структура та газосенсорні властивості нанопорошкових металооксидів.

2. Growth, structure and gas-sensing properties of metal oxide nanopowders.

Реферат/анотація:

1. Робота присвячена комплексному теоретико-експериментальному дослідженню морфологічних, структурних, люмінесцентних і газосенсорних властивостей нанопорошкових металооксидів.Методом молекулярної динаміки проведене математичне моделювання процесів конденсації і утворення нанокластерів ZnO в хімічно-активному середовищі з лазерної плазми та встановлені закономірності формування розмірів, форми, структури, кількості отриманих наночастинок від швидкості охолодження системи та початкової конфігурації системи (тиску газу). Проведене фізико-математичне моделювання процесів окислення нанокластерів Zn в кисневому середовищі і утворення структур типу «ядро-оболонка» методом молекулярної динаміки. Встановлено залежності структури та форми отриманих нанокластерів від початкових температур системи, концентрації газу та розмірів нанокластерів Zn. Встановлено характер зміни

товщини та щільності оксидного шару нанокластерів Zn-ZnO в залежності від початкових температур системи, концентрації газу та розмірів нанокластерів Zn. Виявлені закономірності залежності товщини та щільністі оксидного шару нанокластерів Zn-ZnO від початкових температур системи, концентрації газу та розмірів нанокластерів Zn.Встановлені особливості фотолюмінесцентних властивостей нанопорошкових ZnO, легованих благородними металами, в різних газових середовищах для використання в газовій сенсориці. Досліджено фізико-хімічні закономірності процесів адсорбції на поверхні нанопорошкового ZnO. Встановлені особливості фотолюмінесцентних властивостей нанопорошкових металооксидів на основі ZnO, TiO2, SnO2, в т.ч. лазерно-модифікованих та поверхнево-легованих домішками Au, Ag, Pt, Ni, Cu, Sn в газах O2, N2, H2, CO, CO2. Виявлено характер газосенсорних властивостей нанопорошкових металооксидів (адсорбційна здатність, швидкодія, чутливість, селективність) та вибрано конструкцію і оптимальні матеріали для побудови реєструючої багатокомпонентної матриці (3 x 3).

2. The work is devoted to the complex theoretical and experimental study of the morphological, structural, optical and sensory properties of metal oxide nanopowders.Molecular dynamics has been used to perform mathematical modeling of the condensation and formation processes of ZnO nanoclusters in a chemically active envirement, and to determine the size, shape, structure, number of obtained nanoparticles from the cooling rate of the system, and the initial configuration of the system (gas pressure). Optimal initial conditions were established for the formation of stable ZnO nanoclusters. During the analysis it was found, that the main scenario, during the transition to a lower cooling rates, become coalescence of nanoparticles, and obtained nanoclusters mainly are formed in three structural phases - amorphous, hexagonal wurtzite and cubic zincblende.Physical and mathematical modeling of the processes of oxidation of Zn nanoclusters in the oxygen environment and the formation of «core-shell» structures by molecular dynamics have been carried out. The dependences of the structure and shape of the obtained nanoclusters on the initial temperatures of the system, the gas concentration and the sizes of the Zn nanoclusters have been established. And, also, the thickness and density of the oxide layer of Zn-ZnO nanoclusters were analyzed depending on the initial system temperatures, gas concentration, and the size of Zn nanoclusters. The regularities of the thickness and density of the oxide layer of Zn-ZnO nanoclusters on the initial temperatures of the system, the gas concentration and the size of Zn nanoclusters were revealed.The peculiarities of the photoluminescent properties of ZnO nanopowder doped with noble metals in different gas environments for use in gas sensors have been studied. Physicochemical regularities of adsorption processes on the surface of ZnO nanopowder were investigated. The peculiarities of the photoluminescent properties of the nanopowder ZnO, TiO2, SnO2, WO3 nanopowder, incl. laser-modified and surface-doped Au, Ag, Pt, Ni, Cu, Sn impurities in gases O2, N2, H2, CO, CO2 and it was found that there is a growth in sensory sensitivity to gases. Also, physicochemical regularities of formation of adsorption surface electronic states in initial and doped nanopowders during adsorption of gases have been studied. Established the tendency to reduce the adsorption ability ZnO nanopowders with decreasing size nanogranules to 40-60 nm.A change of ambient gas composition leads to a rather significant change in the intensity of the photoluminescence spectrum and its deformation. The most significant changes in the photoluminescent spectrum were observed for mixed ZnO/TiO2 nanopowders. This obviously is the result of a redistribution of existing centers of luminescence and the appearance of new adsorption centers of luminescence on the surface of nanopowders. The nature of the gas-sensing properties of nanopowder metal oxides (adsorption capacity, speed, sensitivity, selectivity) is revealed, and the design and optimal materials for the construction of a recording multicomponent matrix (3 x 3) are selected.

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. Попович Дмитро Іванович
2. Popovych Dmytro Ivanovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.18

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. Рачій Богдан Іванович
2. Rachii Bohdan Ivanovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.18

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. Пелещак Роман Михайлович
2. Peleshchak Roman Mykhailovych

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	Остафійчук Богдан Костянтинович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Остафійчук Богдан Костянтинович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.