Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0821U102823

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 15-12-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мазур Назар Володимирович
2. Mazur Nazar V.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 105

Назва наукової спеціальності: Прикладна фізика та наноматеріали

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 10-12-2021

Спеціальність за освітою: Прикладна фізика та наноматеріали

Місце роботи здобувача: Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416952

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 41, м. 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): ДФ 26.199.005

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики напівпровідників імені В. Є. Лашкарьова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416952

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 41, м. Київ, 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 Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416952

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 41, м. Київ, 03028, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 47.09.29

Тема дисертації:

1. Ефекти катіонного заміщення у коливних спектрах колоїдних нанокристалів потрійних та четверних халькогенідів

2. Effects of cationic substitution in the vibrational spectra of ternary and quaternary chalcogenide colloidal nanocrystals

Реферат/анотація:

1. Сполуки потрійних (I-III-VI) та четверних (I-II-IV-VI) халькогенідів металів є перспективними матеріалами для фотодетекторів та фотопоглинаючих шарів тонкоплівкових сонячних комірок нового (третього) покоління, флуорофорів та малотоксичних люмінесцентних міток для біомедичних застосувань, термоелектричних та фотокаталітичних пристроїв, суперконденсаторів та інших пристроїв з перетворення та зберігання енергії. Перевагами даних сполук над традиційними (Si, GaAs, CdTe та ін.) є дешевизна компонентів (хімічних елементів) та їх нетоксичність, а також можливість часткового заміщення будь-якого з елементів іншим, який відноситься до того самого періоду періодичної таблиці елементів, що дозволяє модифікувати властивості матеріалу в широких межах. Для даних матеріалів характерне поєднання кількох

важливих фізичних параметрів, таких як високий коефіцієнт оптичного поглинання, спектральне положення краю поглинання в області сонячного випромінювання, хороша електро- та термопровідність, енергетично вигідне положення країв зон з точки зору переносу заряду на інші компоненти приладових структур. Виготовлення даних матеріалів у вигляді колоїдних нанокристалів (НК) має певні переваги над іншими методами. Зокрема, формування певної кристалічної структури та компонентного складу матеріалу здійснюється незалежно від матеріалу (майбутньої) підкладки, її морфології та ін. Сумісність з технологією струменевого друку та іншими технологіями масового і дешевого виробництва тонких плівок додає перспективності широкого застосування таких НК. Фононні спектри НК сполук I-III-VI та I-II-IV-VI на момент початку даної роботи були малодослідженими, оскільки кристалічна структура та компонентний склад даних сполук суттєво залежать від технологічних умов отримання, а серед малочисельних літературних даних існували суперечності в їх інтерпретації. Метою дисертаційної роботи є встановлення особливостей фононних спектрів нанокристалів напівпровідникових сполук Me-In-S (Me = Cu, Ag, Hg) та Me-Zn-Sn-S (Me = Cu, Ag); взаємозв'язку фононних спектрів цих НК зі структурою кристалічної ґратки та компонентним складом; взаємодії між електронною та фононною підсистемами, зокрема прояву її в спектрах резонансного раманівського розсіювання. При виконанні дисертаційної роботи були вперше одержані наступні наукові результати: 1. Вперше досліджено раманівські спектри сполуки Hg-In-S, НК Ag-In-S нестехіометричного складу, низькотемпературні та спектри другого порядку для НК Ag-In-S та Cu-In-S, НК типу ядро (Me-In-S) □ оболонка (ZnS) для всіх трьох сполук (Me = Hg, Ag, Cu). Поєднання цих даних було вирішальним для формулювання висновку щодо того, які комбінації фононів першого порядку можуть утворювати спектр розсіювання другого порядку. 2. Вперше отримано спектри ІЧ поглинання фононами для НК Ag-In-S, Hg-In-S та Cu-In-S, НК типу ядро (Me-In-S) □ оболонка (ZnS) (Me = Hg, Ag, Cu), а також НК Cu-Zn-Sn-S та Ag-Zn-Sn-S різного компонентного складу. 3. Вперше досліджено коливні спектри сполук Ag-Zn-S та Ag-Sn-S. 4. Вирішено одну з основних розбіжностей у літературі по раманівських спектрах сполук I-III-VI, а саме, показано, що раманівські фононні моди у діапазоні 340-350 см-1 зумовлені LO-модами тетрагональної структури типу MeInS2, а не домішкової фази шпінелю, що підтверджується результатами XRD. 5. За допомогою ЕПР досліджень вперше експериментально встановлено існування стану Cu2+ в НК CZTS нестехіометричного складу, що підтверджується результатами електричних вимірювань. 6. Встановлено, що на відміну від продемонстрованої раніше можливості отримання монофазних НК CZTS методом водного низькотемпературного синтезу, отримані таким методом НК (Cu, Ag)-Zn-Sn-S зберігають структуру CZTS лише при малому вмісті Ag (кілька %), а при збільшенні вмісту Ag та переході до Ag-Zn-Sn-S, є комбінацією основної четверної (AZTS або ACZTS) та домішкової потрійної фази Ag-Zn-S. Саме присутністю останньої можна пояснити немотонну залежність краю оптичного поглинання НК Ag-Zn-Sn-S в певному діапазоні компонентного складу, що спостерігалася раніше і в інших роботах, але не знаходила пояснення. Практичне значення одержаних результатів полягає в розробці методики структурної діагностики багатокомпонентних НК нестехіометричного компонентного складу на основі аналізу їх фононних раманівських спектрів. Також розроблена методика реєстрації спектрів раманівського розсіяння від високолюмінесцентних НК шляхом контрольованої функціоналізації НК сильним акцептором електронів. Для тонких плівок НК Cu-Zn-Sn-S різного компонентного складу, встановлено залежність між умовами утворення та термічної обробки плівок та їх електричними властивостями.

2. Compounds of ternary (I-III-VI) and quaternary (I-II-IV-VI) metal chalcogenides are promising materials for photodetectors and absorber layers of thin-film solar cells of the new (third) generation, fluorophores and low-toxic fluorescent labels for biomedical applications, photocatalytic devices, supercapacitors, and other energy conversion and storage devices. The advantages of these compounds are the cheap and non-toxic components (chemical elements), as well as the possibility of partial substitution of any of the elements, which allows the properties of the material to be modified in a wide range. These materials are characterized by a combination of several important physical parameters, such as high optical absorption coefficient, the spectral position of the absorption edge in the range of solar radiation, good electrical and thermal conductivity, advantageous position of the band edges in terms of charge transfer to other components. The production of these materials in the form of

colloidal nanocrystals (NC) has certain advantages over other methods. In particular, the formation of a certain crystal structure and component composition of the material is carried out independently of the material of the (future) substrate, its morphology, etc. Compatibility with inkjet technology and other technologies of inexpensive large-scale production of thin films is an additional benefit of application of colloidal NC. The phonon spectra of I-III-VI and I-II-IV-VI NCs were little studied before this work was started, because the crystal structure and component composition of these compounds significantly depend on the technological conditions of production. Even among the available data, there were inconsistencies in interpretation. This thesis aims to establish the features of the phonon spectra of small-size I-III-VI and I-II-IV-VI NCs; the relationship of phonon spectra with the structure of the crystal lattice and component composition; the interaction between electron and phonon subsystems, in particular in the resonance Raman scattering spectra. There following scientific results were obtained in this thesis: 1. Raman spectra of Hg-In-S compound and non-stoichiometric Ag-In-S NCs, low-temperature and second-order spectra for Ag-In-S and Cu-In-S NCs, core-shell (ZnS) NCs for all three compounds were studied for the first time. The combination of these data was crucial for the assumption that combinations of first-order phonons can form a second-order scattering spectrum. 2. Spectra of IR absorption by phonon in Ag-In-S, Hg-In-S, Cu-In-S NC, core-shell (ZnS) NC based on them, as well as Cu-Zn-Sn-S and Ag-Zn-Sn-S NCs of different component composition were studied for the first time. 3. The vibrational spectra of Ag-Zn-S and Ag-Sn-S compounds were studied for the first time. 4. One of the main contradictions in the literature on Raman spectra of I-III-VI compounds is solved, namely it is shown that Raman phonon modes in the range 340-350 cm-1 are caused by LO modes of the tetragonal structure of MInS2 type, and not by modes of spinel impurity phase, in agreement with XRD results. 5. With the help of EPR studies the existence of Cu2+ in non-stoichiometric CZTS NCs is experimentally confirmed for the first time, and corroborated by the results of electrical measurements. 6. It is established that in contrast to the previously established possibility of obtaining single-phase CZTS NCs by the method of aqueous low-temperature synthesis, (Cu,Ag)-Zn-Sn-S NCs obtained by this method retain the structure of CZTS only at low Ag content (several %). With increase of Ag content and transition to Ag-Zn-Sn-S, a combination of the main quaternary (AZTS or ACZTS) and impurity ternary phase Ag-Zn-S is formed. The presence of the latter phase can explain the non monotonous dependence of the optical absorption edge of Ag-Cu-Zn-Sn-S NC in a certain range of Ag/Cu content, which was observed also earlier in other works but did not find an explanation. The practical significance of the obtained results consists of the development of a method of structural diagnostics of multicomponent NCs of nonstoichiometric component composition based on the analysis of their phonon Raman spectra. A method for obtaining Raman scattering spectra from highly luminescent NCs by controlled functionalization with a strong electron acceptor has also been developed. For thin films formed from Cu-Zn-Sn-S NCs of different component compositions, the relationship between the conditions of formation and heat treatment of films and their electrical properties is established.

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. Джаган Володимир Миколайович

2. Dzhagan Volodymyr M.

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

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Дмитрук Ігор Миколайович

2. Dmitruk Igor M.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.05

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. Гомоннай Олександр Васильович

2. Gomonnai Alexander V.

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Стронський Олександр Володимирович
2. Stronski Alexander V.

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Шпортько Костянтин Валентинович
2. Shportko Kostiantyn V.

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

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Рудько Галина Юріївна
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Рудько Галина Юріївна
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.

