

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U004629

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 29-10-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бондар Іван Сергійович

2. Bondar Ivan S.

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: 15-10-2019

Спеціальність за освітою: фізика, вчитель фізики та математики

Місце роботи здобувача: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Веркіна  
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, 47, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61103, 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 64.175.03

**Повне найменування юридичної особи:** Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Веркіна Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 03534601

**Місцезнаходження:** проспект Науки, 47, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61103, 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:** Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Веркіна Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 03534601

**Місцезнаходження:** проспект Науки, 47, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61103, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 29.19.11, 29.19.19, 29.19.23

**Тема дисертації:**

1. Вплив неоднорідностей кристалічної структури на електронні властивості гексагональної модифікації дихалькогеніду ніобію та графену
2. Effect of the crystal structure inhomogeneities on electronic properties of a hexagonal modification of niobium dichalcogenide and graphene

**Реферат:**

1. Дисертацію присвячено аналізу особливостей поведінки матеріалів на основі графену та гексагональної модифікації шаруватого з'єднання діселеніду ніобію з дефектами при зміні температури, виявленні їх загальних закономірностей і можливостей управління їх електронними властивостями. В рамках дослідження встановлено, що зв'язок мінімумів на температурних залежностях КЛТР та максимумів на розрахункових залежностях відношень похідних СКЗ дозволяє перевіряти (або ж добувати) інформацію про міжатомну взаємодію в сильноанізотропних кристалічних структурах. Крім того, на основі аналізу температурних залежностей СКЗ були встановлені інтервали стабільності плоскої форми досліджуваних нанотворень. Вперше виявлено і проаналізовано аномалії температурної залежності коефіцієнтів лінійного

теплого розширення вздовж різних напрямків: в шаруватих кристалах, сформованих як моноатомними шарами (графенові наноплівки), так і багатшаровими «сендвічами» (дихалькогеніди перехідних металів). А також визначено, що в електронних спектрах атомів підґратки, що не містить вакансію (тобто тієї підґратки до якої належать її найближчі сусіди), виникають локалізовані рівні з енергією поблизу фермієвської, в той час як LDOS атомів підґратки, що містить вакансію, рівна нулю (як і у бездефектного графену). І показано, що зубці на ланцюжках атомів з порушеними зв'язками сприяють збільшенню густини електронних станів поблизу рівня Фермі.

2. The presented thesis is focused on the study of peculiarities in low-temperature behavior of the graphene derivatives and hexagonal modification of niobium diselenide with the low-dimensional structure imperfections, identification of their common features and potentialities for a controlled tuning of their electronic properties in smart applications. Structural analysis and numerical experiments have shown a close relationship between singularities on the measured temperature dependences of linear thermal expansivities (LTE) and of calculated ratios of rms displacements (RMSD). In this way, novel information about atomic interactions in highly anisotropic materials can be obtained and verified. In addition, a comprehensive analysis of RMSD evolution with temperature allowed us to find the temperature ranges of planar stability in the materials under study and, thus, the conditions for nanoformations occurrence. For the first time, anisotropic expansion along different crystal lattice directions was analysed in layered crystals, constituted by both monoatomic planes, and multilayer “sandwiches”. Numerical experiment, using original computational technique, within a tight-binding approximation, has elucidated effect of next-to-nearest neighbour atomic coupling on electronic properties of graphene with vacancy imperfections, which is manifested in evolution of the local densities of states (LDOS) of carriers due to formation of dangling bonds at vacancies. It was also shown, that step-edges in the thin graphene nanofilms result in growth of LDOS near Fermi level.

**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. Сіренко Валентина Анатоліївна

2. Sirenko Valentyna A.

**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. Тарапов Сергій Іванович

2. Tarapov Sergii I.

**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. Скрипник Юрій Вікторович

2. Skrypnyk Yuriy 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

Рецензенти

### VIII. **Заключні відомості**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
голови ради**

Найдюк Юрій Георгійович

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

Найдюк Юрій Георгійович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.