Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0417U000709

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-04-2017

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Бокотей Олеся Володимирівна
2. Bokotey Olesya Volodymyrivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.10

Назва наукової спеціальності: Фізика напівпровідників і діелектриків

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 24-03-2017

Спеціальність за освітою: 8.070203

Місце роботи здобувача: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: 88000 Закарпатська обл., м.Ужгород вул.Підгірна.46

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 61.051.01

Повне найменування юридичної особи: ДВНЗ "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження: пл. Народна, 3, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88000, 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: Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: 88000 Закарпатська обл., м.Ужгород вул.Підгірна.46

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.31, 29.19.33

Тема дисертації:

1. Першопринципні розрахунки електронних та фононних підсистем і оптичні властивості гіротропних кристалів типу Hg3X2Y2

2. First-principles calculations of electrons and phonons subsystems and optical properties of Hg3X2Y2 type gyrotropic crystals

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена дослідженню із перших принципів електронних та фононних підсистем і оптичних властивостей гіротропних кристалів типу Hg3X2Y2. Проведено порівняльний аналіз впливу аніонного заміщення на електронну структуру кубічних халькогалогенідів меркурію. Встановлено, що аніонне заміщення Te Se S у сполуках Hg3X2Y2 призводить до збільшення ширини забороненої зони. Використовуючи наближення LDA+U для розрахунків зонної структури кристалів Hg3Te2Cl2 та Hg3Se2Cl2, вдалося отримати значення непрямої забороненої зони, близькі до експериментально визначених із аналізу оптичних спектрів. Особливістю валентної зони електронних спектрів потрійних сполук Hg3X2Y2 є наявність п'ятьох відокремлених підзон, сформованих гібридизацією s/p-станів катіона та аніонів. Проаналізовано вплив точкових дефектів на формування зонної структури кристала Hg3Te2Cl2 з використанням моделі

суперкомірок. Показано, що аніонні вакансії модифікують структуру енергетичних зон, що відображається на електронних та оптичних властивостях досліджуваного кристала. Встановлено, що природа міжатомних взаємодій у кристалах типу Hg3X2Y2 має комбінований характер та включає іонну та ковалентну складові. Проведено детальний аналіз симетрії фундаментальних мод, дисперсії фононів, загальної та парціальних густин фононних станів для кристала Hg3Te2Cl2. Представлено моделювання раман-спектра та ідентифікацію фононних характеристичних смуг для визначення значень коливань атомів на основі їх симетрійного аналізу в порівнянні з результатами розрахунків динаміки гратки кристала Hg3Te2Cl2. Встановлено, що всі оптичні моди активні в раман-спектрах. Моди T симетрії активні як у спектрах комбінаційного розсіювання, так і у спектрах ІЧ-поглинання, що пов'язано з відсутністю центра симетрії в досліджуваному кристалі. На основі досліджень електронних енергетичних спектрів проведено інтерпретацію експериментальних результатів по дослідженню оптичної активності у кристалах Hg3X2Cl2 (X = Se, Te). Встановлено кореляцію між існуванням явища оптичної активності та реалізацією прямих оптичних переходів у досліджуваних сполуках. Розраховано компоненти тензора гірації для кристала Hg3Se2Cl2. Проведено теоретичні розрахунки значень показників заломлення, оптичних діелектричних констант та коефіцієнтів відбивання для поліморфів (a), (b), (c) - Hg3S2Cl2 та кристала Hg3Te2Cl2 у рамках моделі зв'язуючих орбіталей Харрісона. Розрахунки проведено для спектральної області, далекої від краю поглинання, де відсутня дисперсія показника заломлення. Показано, що модель Харрісона дозволяє аналізувати оптичні властивості сполук типу Hg3X2Y2.

2. The thesis is devoted to the investigation from the first-principles the electrons and phonons subsystems and optical properties of Hg3X2Y2 type gyrotropic crystals. The comparative analysis of the anionic substitution influence on the electronic structure of cubic mercury chalcogenhalogenides was conducted. It was established that anionic Te Se S substitution in the Hg3X2Y2 compounds leads to the bandgap width increase. Using LDA+U approximation for calculations of Hg3Te2Cl2 and Hg3Se2Cl2 crystals band structure values of the indirect band gap close to experimentally determined from the analysis of optical spectra were obtained. The presence of five separated subbands formed by hybridization of s/p- states of cation and anions is the feature of electronic spectrum in the valence band of ternary Hg3X2Y2 compounds. The influence of point defects on the formation of Hg3Te2Cl2 crystal band structure using the supercell method was analyzed. It was shown that anionic vacancies modify the structure of energy bands that reflects on the electronic and optical properties of crystal under investigation. It was established that the nature of interatomic interactions in the crystals of Hg3X2Y2 type has complex character and includes ionic and covalent parts. The detailed symmetry analysis of the fundamental modes, phonons dispersion, total and partial phonons density of states for Hg3Te2Cl2 crystal was conducted. The simulation of the Raman spectrum and identification of the phonons characteristic lines to define atomic vibrations values was performed on the basis of their symmetry analysis in close comparison with results of lattice-dynamical calculations for Hg3Te2Cl2 crystal. It was found that all the optical modes are active in Raman spectra. The modes of T symmetry are active in both Raman spectra and IR-spectra due to absence of symmetry center in the studied crystal. The interpretation of experimental results of optical activity study in Hg3X2Cl2 (X = Se, Te) crystals was performed on the basis of energy electrons spectra studies. The correlation between the existence of optical activity phenomenon and realization of direct optical transitions in studied crystals was established. The gyration tensor components for Hg3Se2Cl2 crystal were calculated. Theoretical calculations of values of refractive indices, optical dielectric constants and reflection coefficients for (a), (b), (c) - Hg3S2Cl2 polymorphs and Hg3Te2Cl2 crystal within Harrison's bonding orbitals model were carried out. The calculations were performed for the spectral region far from the absorption edge, where the dispersion of refractive index is absent. It was shown that Harrison's model allows to analyze the optical properties of Hg3X2Y2 type compounds.

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. Небола Іван Іванович
2. Nebola Ivan Ivanovych

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. Лукіянець Богдан Антонович
2. Лукіянець Богдан Антонович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.02

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. Маслюк Володимир Трохимович
2. Маслюк Володимир Трохимович

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