Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0404U003903

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-11-2004

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Токій Наталя Валентинівна

2. Tokiy Natalya Valentinovna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: ні

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: 07-10-2004

Спеціальність за освітою: 7.070101

Місце роботи здобувача: Донецький фізико-технічний інститут Національної Академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05420497

Місцезнаходження: 83048, Україна, Донецьк, вул. Р. Люксембург, 72

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 11.184.01

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Донецький фізико-технічний інститут Національної Академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05420497

Місцезнаходження: 83048, Україна, Донецьк, вул. Р. Люксембург, 72

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19.11

Тема дисертації:

1. Моделювання впливу дефектів кристалічної будови на електронну підсистему кристалу

2. Modeling of influence of defects of crystal structure on an electronic subsystem of a crystal

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена питанням виявлення механізмів формування структур і фізичних властивостей кристалічних середовищ різних типів з іонним, ковалентним і металевим зв'язками. Розроблено методику моделювання впливу дефектів низької розмірності (домішок, вакансій, локальних вигинів, дислокацій, зовнішніх поверхонь) на атомну й електронну структури таких кристалів, що визначають їх конструкційні та функціональні властивості. Моделювання включає розрахунок впливу цих дефектів на електронний енергетичний спектр, електронне зображення, електронні, парамагнітні, транспортні і механічні властивості кристалів, у рамках теорії сильного зв'язку, теорії дислокацій, теорії дифракції електронів. За допомогою комп'ютерного моделювання в рамках однієї квантово-механічної моделі розрахована електронна структура та передбачено вплив усіх домішкових d- елементів у діоксиді цирконію на транспортні властивості аніонної вакансії. На підставі розробленої методики встановлена реальна атомна структура домішкових центрів літію і фосфору в ковалентному алмазі за допомогою порівняння результатів комп'ютерного моделювання

електронної структури з експериментальними даними по напівпровідникових і парамагнітних властивостях. Встановлено параметри реальної структури релаксованої (1x1) і реконструйованої (2x1) атомарно-чистої і покритої воднем поверхні (111) алмазу, що контролюють парамагнітні властивості алмазних мікро- і нанопорошків, а також фотоелектричні властивості алмазних плівок. Розвинуто динамічну квантово-механічну теорію електронно-мікроскопічного зображення локального неоднорідного вигину кристалічної ґратки, що враховує зміну умов проходження електронного пучка при зміні кута нахилу фольги, що дозволяє вимірювати компоненти тензора вигину-крутіння. Визначено параметри локального дипольного вигину, що контролюють фізико-механічні властивості металів і сплавів. Використовуючи отримані параметри, установлена можлива дислокаційна структура такого вигину, розраховані поля деформацій і оцінені поля напружень, що викликані цим вигином у пластині та необмеженому кристалі. Створено фізичні основи цілеспрямованого формування сполуки та структури кристалів з низьковимірними недосконалостями, що мають нові корисні властивості.

2. The dissertation is devoted to questions of revealing of mechanisms of formation of structures and physical properties of crystals of different types with ionic, covalent and metal connection. The technique of modeling of influence of defects of low dimension (impurity, vacancies, local bends, dislocations, external surfaces) on atomic and electronic structures of such crystals determining them constructional and functional properties is developed. The modeling includes account of influence of these defects on an electronic energy spectrum, electronic image, electronic, paramagnetic, transport and mechanical properties of crystals, within the framework of the tight-binding theory, theory of dislocations, theory of diffraction of electrons. With the help of computer modeling within the framework of one quantum-mechanical model the designed electronic structure also is stipulated influence all impurity d- of elements in zirconia on transport properties of anion vacancy. On the basis of the developed technique the real atomic structure impurity of centers lithium and phosphorus in covalent diamond with the help of comparison of results of computer modeling of electronic structure with experimental data on semiconductor and paramagnetic to properties is established. The parameters of real structure of atomic-pure and covered with hydrogen relaxation (1x1) and reconstructed (2x1) of the diamond surface (111) supervising paramagnetic properties diamond micro- and nanopowders and also photoelectric properties diamond films are established. The dynamic quantum-mechanical theory of the electronic-microscopic image of a local non-uniform bend of a crystal lattice taking into account change of conditions of passage of an electronic beam is advanced at change the foil inclination angle of a allowing to measure components of bending-torsion tensor. The parameters local dipole of a bend supervising physical-mechanical properties of metals and alloys are determined. Using the received parameters, the structure of such bend is established possible dislocation, the fields of deformations are designed and the stress fields caused by this bend in a plate and unlimited crystal are appreciated. The physical bases of purposeful formation of structure and structure of crystals with low dimension by imperfections are created which have new useful properties.

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. Варюхін Віктор Миколайович

2. Varyukhin Viktor Nikolaevich

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.07, 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. Пашкевич Юрій Георгійович

2. Пашкевич Юрій Георгійович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.07, 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. Картузов Валерій Васильович

2. Картузов Валерій Васильович

Кваліфікація: к.ф.-м.н., 01.01.02, 05.02.01

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 Варюхін Віктор Миколайович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Варюхін Віктор Миколайович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.