Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0418U000810

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 14-06-2018

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кравцова Дар'я Юріївна

2. Kravtsova Daria

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: 29-05-2018

Спеціальність за освітою: 8.04020301

Місце роботи здобувача: Державний вищий навчальний заклад "Криворізький державний педагогічний університет"

Код за ЄДРПОУ: 40787802

Місцезнаходження: 50086, м. Кривий Ріг, пр-т. Гагаріна, 54

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): К41.053.07

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: Державний вищий навчальний заклад "Криворізький державний педагогічний університет"

Код за ЄДРПОУ: 40787802

Місцезнаходження: 50086, м. Кривий Ріг, пр-т. Гагаріна, 54

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19, 29.19

Тема дисертації:

1. Електронна структура та фізико-хімічні властивості мета- і наноматеріалів

2. Electron structures, physical and chemical properties of meta- and nanomaterials

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена вивченню особливостей електронних структур та фізико-хімічних властивостей актуальних мета- і наноматеріалів. Дослідження виконані методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів. Встановлено, що складені із волокон нанопористого GaAs або волокон графен-SiO2 фотонні кристали - вузькозонні. Помічено осциляції ширини забороненої зони від відстані між волокнами. Кількісно визначено чутливість фотонного кристалу, складеного із волокон графен-SiO2, до напрямку збурюючого електромагнітного поля. Показано, що ширина електронної забороненої зони фотонного кристалу опалового типу на основі TiO2-рутил не залежить від форми наночастинки, а тільки від періоду їх укладання в просторі метаструктури. Чисельно визначено макроскопічні діелектричні проникності та піки у спектрах поглинання при різних напрямках збурюючого електромагнітного поля відносно формуючих елементів кристалу. Фотонний кристал, складений із наночастинок TiO2-анатаз, не змінює діелектричних властивостей при зміні періоду укладання або при зміні напрямку збурюючого

електромагнітного поля. Помічено особливості у просторовому розподілі електронної густини у острівцевих плівках із Ni, Cu та Ni0,8Fe0,2, якими пояснено появу ємнісного характеру провідності в експерименті. Встановлено осциляції ширин забороненої зони в електронному спектрі острівцевих плівок Ni0,8Fe0,2, Ni, Cu зі збільшенням відстані між острівцями. Обчислено енергетичні рельєфи підходу атома парової фази до зростаючої плівки твердого розчину AlGaN. Виявлено рівність ймовірностей існування плівок GaN та AlGaN, котра обумовлює безбар'єрний механізм заміщення атомів Ga на атоми Al і навпаки та пояснює неконтрольованість процесу утворення твердого розчину AlGaN. Проаналізовано вплив підкладки для наноплівки GaN на зростання плівки AlGaN. Встановлено організацію електронної структури вищих основних та нижчих збуджених станів для 1-6 атомних нанокластерів перехідних металів Cu, Ni, Co, їх оксидів та силіцидів. Показано, що включення у кластери Cu, Ni, Co акцепторних атомів Si сприяє зменшенню енергії збудженого стану. Встановлено твердість нанокластерів алмазу, кубічного BN та їх композиту. Пояснено механізм їх високої твердості за рахунок утворення орієнтаційного дефекту. Знайдено, що вдалим поєднанням високої твердості та хімічної інертності володіє нанокластер композиту cC-cBN вкритий бором.

2. The dissertation is devoted to the study of the electron structures, physical and chemical properties of actual meta- and nanomaterials. Methods of density functional theory and pseudopotential from the first principles have been used. It has been determined that a photon crystals composed of fibers of a porous GaAs or fibers of graphene-SiO2 form narrow-gap band crystals. Oscillations of the band gap from the distance between the fibers have been recorded. It has been quantified that photonic crystal composed of fibers of graphene-SiO2 is sensitive to the direction of the perturbing electromagnetic field. It has been discovered that the electron band gap of the opal photonic crystal based on TiO2-rutile is independent of the shape of the nanoparticle, but dependent only from the period of their laying in the metastructure space. The photonic crystal composed of TiO2-anatase nanoparticles does not change the dielectric properties when changing the laying period or when changing the direction of the perturbing electromagnetic field. The peculiarities in the spatial distribution of electronic density in island films of Ni, Cu and Ni0,8Fe0,2, which explain the appearance of the capacitive conductivity in the experiment, have been recorded. The oscillation of the band gap in the electronic spectrum of Ni0,8Fe0,2, Ni, Cu island films with an increase in the distance between the islands has been recorder. The energy reliefs of the motion of the atom of the vapor phase to the growing film of the AlGaN solid solution have been calculated. The influence of GaN nanofilm substrate on the growth of the AlGaN film has been analyzed. The organization of the electronic structure of higher ground and lower excited states for 1-6 atomic nanoclusters of transition metals Cu, Ni, Co, their oxides and silicides has been represented. It has been shown that the inclusion of acceptor Si atoms in Cu, Ni, Co clusters reduces the energy of the excited state. The hardness of diamond nanoclusters, cubic BN and their composite has been determined. The mechanism of their high hardness due to the formation of orientation defect has been explained.

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. Балабай Руслана Михайлівна

2. Balabai Ruslana

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. Балабай Руслана Михайлівна

2. Balabai Ruslana

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. Хижун Олег Юліанович

2. Хижун Олег Юліанович

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. Хижун Олег Юліанович
2. Хижун Олег Юліанович

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. Пташенко Олександр Олександрович
2. Пташенко Олександр Олександрович

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. Пташенко Олександр Олександрович

2. Пташенко Олександр Олександрович

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