

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0423U100013

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-01-2023

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Копач Василина Вікторівна

2. Kopach Vasylyna V.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 02.00.21

Назва наукової спеціальності: Хімія твердого тіла

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 10-01-2023

Спеціальність за освітою: Хімія

Місце роботи здобувача: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

Код за ЄДРПОУ: 02071240

Місцезнаходження: вул. Коцюбинського, буд. 2, м. Чернівці, Чернівецька обл., 58012, Україна

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 76.852.42

**Повне найменування юридичної особи:** Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

**Код за ЄДРПОУ:** 02071240

**Місцезнаходження:** вул. Коцюбинського, буд. 2, м. Чернівці, Чернівецька обл., 58012, 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:** Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

**Код за ЄДРПОУ:** 02071240

**Місцезнаходження:** вул. Коцюбинського, буд. 2, м. Чернівці, Чернівецька обл., 58012, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### V. Відомості про дисертацію

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 31.15.19

**Тема дисертації:**

1. Фізико-хімічні закономірності фазових перетворень та властивості стопів потрійної системи CdTe–ZnTe–MnTe
2. Physical and chemical regularities of phase transitions and properties of CdTe–ZnTe–MnTe ternary system

**Реферат:**

1. Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата хімічних наук за спеціальністю 02.00.21 – хімія твердого тіла (хімічні науки). – Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, Чернівці, 2022. Дисертація присвячена вивченню фазових перетворень в системі CdTe–MnTe–ZnTe зі сторони CdTe та дослідженню властивостей монокристалів Cd<sub>1-x</sub>уMnxZnyTe (x=0.05 – 0.30, y = 0.05–0.15). Методом диференціального термічного аналізу досліджено параметри топлення та кристалізації стопів складу Cd<sub>1-x</sub>уMnxZnyTe (x=0.10 – 0.30, y = 0.05–0.15). Встановлено, що з підвищенням концентрації MnTe у вихідних стопах від 10 до 30 %, температура початку ефекту топлення стопів (солідус системи) має тенденцію до зниження, у той час збільшення вмісту ZnTe у стопах призводить до підвищення температури початку ефекту топлення досліджуваних зразків. Вирощено серію монокристалів Cd<sub>1-x</sub>уMnxZnyTe (x=0.05 – 0.30, y =

0.05 – 0.15). Досліджено кількісний розподіл вкраплень другої фази у вирощених злитках. На основі результатів рентгеноструктурних досліджень визначено, що значення сталої ґратки досліджуваних злитків  $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Te}$  ( $x=0.05 - 0.30$ ,  $y = 0.05-0.15$ ) лінійно зменшується від 6,43(1) Å до 6,37(5) Å зі збільшенням концентрації Mn та Zn. У результаті проведених оптичних вимірювань встановлено, що величина ширини забороненої зони кристалів  $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Te}$  ( $x=0.05 - 0.30$ ,  $y = 0.05 - 0.15$ ) лінійно зростає із збільшенням вмісту MnTe та ZnTe. Вивчення природи домінуючих носіїв заряду у кристалах  $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Te}$  за різних температур показали, що спостерігається підвищений вміст в кристалах вакансій металу. Ключові слова: система CdTe–MnTe–ZnTe, ДТА, температура топлення, температура кристалізації, об'ємна частка твердої фази, фазові перетворення, монокристали  $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Te}$ , XRD - аналіз, високотемпературні електричні вимірювання, точкові дефекти.

2. Thesis for obtaining the scientific degree of candidate of chemical sciences in the specialty 02.00.21 – Solid State Chemistry (chemical sciences). – Yuriy Fedkovych Chernivtsi National University, Chernivtsi, 2022. The thesis is devoted to the study of phase transitions in the CdTe–MnTe–ZnTe system from the CdTe side and experimental investigation of the properties of  $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Te}$  single crystals ( $x = 0.05 - 0.30$ ,  $y = 0.05-0.15$ ). The differential thermal analysis (DTA) method was used for investigation of the melting and crystallization kinetic parameters of  $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Te}$  alloys ( $x = 0.10 - 0.30$ ,  $y = 0.05-0.15$ ). It was found that the changing of the MnTe content from 10 to 30 mol. % decreases a melting temperature from  $1367 \pm 1$  K to  $1358 \pm 1$  K (for  $\text{Cd}_{0.95-x}\text{Mn}_x\text{Zn}_{0.05}\text{Te}$ ,  $x=0.10 - 0.30$ ), from  $1363 \pm 1$  K to  $1360 \pm 1$  K (for  $\text{Cd}_{0.90-x}\text{Mn}_x\text{Zn}_{0.10}\text{Te}$  alloys,  $x=0.10 - 0.30$ ), from  $1378 \pm 1$  K to  $1370 \pm 1$  K for  $\text{Cd}_{0.85-x}\text{Mn}_x\text{Zn}_{0.15}\text{Te}$  alloys ( $x=0.10 - 0.20$ ). The ZnTe content increasing led to an increase in the melting temperature of the samples from  $1358 \pm 1$  K to  $1375 \pm 1$  K. The activation energies of melting and crystallization processes for  $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Te}$  alloys under different conditions are established. The dependence of the logarithm of the preexponential factor on the activation energy of melting process for  $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Te}$  ( $x=0.10 - 0.30$ ,  $y = 0.10 - 0.15$ ) melts has a linear behavior and corresponds to the compensation effect. The values of the activation energy  $E_a$  for crystallization process of  $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Te}$  melts ( $x = 0.20 - 0.30$ ,  $y = 0.05 - 0.15$ ) are 380 – 820 kJ/mol and are commensurate with the activation energies of the crystallization process of pure CdTe and alloys of CdTe–In systems. This means that the dominant role in crystallization processes of these alloys belongs to the structure centered on the role of CdTe bonds. These results are in good agreement with previously published results concerning melting and crystallization processes for CdTe-based melts. Based on the obtained differential thermal analysis data,  $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Te}$  single crystals ( $x = 0.05 - 0.30$ ,  $y = 0.05 - 0.15$ ) were grown by the vertical Bridgman method. The structural perfection of the crystals decreases with increasing ZnTe content. This is due to the fact that the process of growing ingots with 15% ZnTe requires higher growth temperatures ( $T_{\text{melt}}(\text{ZnTe}) = 1568$  K). It is also interesting that the presence of twins is not observed in all grown ingots. Only  $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Te}$  ( $x = 0.20, 0.30$  and  $y = 0.05, 0.10$ ) crystals are single-grain with large number of twins. Our data is in agreement with the analyses the morphology and crystallography of twins in  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$  ( $x=0.2$  and  $x = 0.35$ ) crystal. Thus, 0.05 and 0.10 mol. % of Zn has no influence at twins formation in process of  $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Te}$  ( $x = 0.20, 0.30$  and  $y = 0.05, 0.10$ ) crystals growth. The typical IR microscope images of all as-grown crystals show that the size of Te inclusions was about 5–20 nm in all samples. But the Te inclusions in some ingots were distributed across the entire plane of the crystals uniformly, while in the other ingots Te precipitates show evidently tendency to ordering in quasi parallel lines and stacking faults formation that can be caused by lateral mechanism of the crystal growth. According to XRD-analyses the value of the lattice constant of the  $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Te}$  ingots ( $x = 0.05 - 0.30$ ,  $y = 0.05-0.15$ ) linearly decreases from 6.43(1) Å to 6.37(5) Å with increasing MnTe and ZnTe concentration. By measuring the transmission spectra, it was determined that the band-gap of the grown semiconductor crystals linearly increases with an increasing amount of MnTe and ZnTe. According to the results of the high temperature Hall-effect investigations, it was found that the lattice of grown  $\text{Cd}_{1-x-y}\text{Mn}_x\text{Zn}_y\text{Te}$  crystals is unstable and its stabilization is achieved by holding the samples for several hours at 873 K–973 K. The study of the nature of the dominant charge carriers in the investigated ingots at different temperatures showed that there is an increased content of metal vacancies in these crystals. Keywords: CdTe–MnTe–ZnTe system, differential thermal analysis (DTA), melting temperature, crystallization temperature, solid phase (clusters), phase transitions,  $\text{Cd}_{1-x}$ -

yMnxZnyTe single crystals, XRD-analyses, high-temperature electrical measurements, point defects.

**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. Фочук Петро Михайлович
2. Fochuk Petro Mykhailovych

**Кваліфікація:** д.х.н., 02.00.21, 02.00.21

**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. Бондар Анатолій Адольфович
2. Bondar Anatolii A.

**Кваліфікація:** д. х. н., 02.00.04

**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. Томашик Василь Миколайович

2. Tomashyk Vasyl Mykolaiovych

**Кваліфікація:** д.х.н., 02.00.01

**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**

Халавка Юрій Богданович

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

Халавка Юрій Богданович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.