Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0410U002473

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 02-06-2010

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Овсяннікова Любов Іванівна

2. Ovsiannikova Liubov Ivanivna

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: 19-05-2010

Спеціальність за освітою: 01.04.10

Місце роботи здобувача: Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: 03680, м. Київ -142, вул. Кржижановського, 3

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 26.207.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Кржижановського, 3, м. Київ, Київська обл., 03142, 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: Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: 03680, м. Київ -142, вул. Кржижановського, 3

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19

Тема дисертації:

1. Електронна будова і оптичні спектри прогнозованих оболонкових кластерів з елементів IV, III-V, II-VI груп

2. Electronic structure and optical spectra of predictive cage clusters based on IV-IV, III-V, II-VI group elements

Реферат/анотація:

1. Методами обчислювальної фізики зроблено прогноз існування ряду оболонкових кластерів типу XnYn, з яких можна конструювати цеолітоподібні кристали на основі сполук типу AIVBIV, AIIIBV і AIIBVI. В рамках методу Хартрі-Фока (RHF/6-31G(d)) досліджено і систематизовано характерні параметри кластерів C2n, BnNn, SinCn (n = 12, 16, 18, 24, 36, 60) і ZnnOn, GanNn (n =12): геометрію структури, перенос заряду, ширину забороненої щілини, повну енергію, енергію когезії, побудовано карти електронної щільності. Встановлено вплив геометричного фактору на стабільність кластерів - немонотонну залежність енергії когезіі і довжини зв'язку від геометрії кластера і кількості атомів. Найбільшу перевагу мають кластери XnYn при n ? 36, 48, які не мають в своєму складі восьми- та десятичленних кілець.Вперше розраховано інфрачервоні (ІЧ) спектри поглинання та спектри комбінаційного розсіювання (КР) (крім кластеру B24N24) і моди коливань кластерів C2n, BnNn і SinCn (n = 12, 24) і ZnnOn, GanNn (n = 12). У ІЧ спектрах поглинання бінарних кластерів найбільш

інтенсивні піки коливань відповідають модам з тангенціальним зсувом атомів, у спектрах КР - повносиметричним "дихаючим" модам коливань. Для кластерів С24, С48, як для фулеренів, найбільш інтенсивні піки коливань в спектрі ІЧ поглинання відповідають моді з радіальними антисиметричними коливаннями, а в спектрі КР - відповідають моді з тангенціальними коливаннями атомів. Частоти коливань, зі збільшенням маси складових атомів в кластері, зміщуються в бік нижчих частот. Встановлено розмірний ефект - зсув частот тангенціальних валентних коливань в бік підвищення, пов'язаний з скороченням зв'язків при збільшенні кількості атомів в кластері.

2. The prediction of a set of cage crystal-forming clusters XnYn occurrence from wich zeolite-like crystals based on compounds AIVBIV, AIIIBV and AIIBVI can be constructed, has been made by quantum mechanics methods. A set of cage crystal-forming clusters BN has been theoretically calculated and extended on alter-idem sets of isoelectronic AIVBIV, AIIIBV and AIIBVI compounds. A general approach to the design of crystal-forming fullerene-like clusters XnYn, from wich zeolite-like crystals based on IV-IV, III-V, II-VI compounds whith diamond-like sp3 bonds can be constructed and synthesized by means of copolymerization through faces has been formulated. If the number of isolated facets equals to 4, 6, 8, 12, tetrahedral, cubic and hexagonal symmetry of crystal are formed, correspondently. The properties of set of crystal-created clusters - C2n, BnNn, SinCn (n = 12, 16, 18, 24, 36, 60) and ZnnOn, GanNn. (n =12) have been researched and systematized. The clusters n = 12, 16, 18, 36 correspond to the rule of isolated squares, n = 24 - isolated octagons, and n = 60 - isolated decagons. Their optimized configuration, electronic structure, charge transfer, band gap, total energy, cohesion energy, maps of electronic density have been calculated by using spin restricted Hartree-Fock method RHF in the 6-31G basis set. IR and Raman spectra and modes of vibrations for clusters C2n, BnNn and SinCn (n = 12, 24) and ZnnOn, GanNn (n = 12) have been calculated and analysed. All the optical spectra have been calculated for the first time (except B24N24). Calculations were carried out using GAMESS and Gaussian program package. ChemCraft and Molekel program package have been used for visualization. After the optimization, the structures of all clusters deviate from a regular geometric configuration and remain stable. In all clusters (except C2n) a charge transfer and heteropolar and ionic components of the interatomic bond lead to molecular faces corrugation. Herewith, the bond lengths and bond angles deviate from those in regular geometric configurations. The Y? ions are displaced outside the cluster, while the X+ ions are displaced inside the cluster. Non-monotonic dependence of the stability of cage crystal-forming clusters (cohesive energy per atom and bond lengths) on the cluster geometry and the number of atoms have been determined. The XnYn clucters with n ? 36, 48, which do not have eight- and tenmembered rings are the most stable. The calculated cohesive energy (7,3 eV) per atom in C72 clucter is close to the experimental cohesive energy for grafite (7,4 eV). The calculated bonding energies (4,04 eV) per atom in B12N12 cluster are close to the experimental value obtaned for hexagonal boron nitide (4,0 eV). It was shown that in calculated IR absorption spectra of clusters (except C2n) the most intensive vibrations correspond to the mode with atom tangential displacement. In calculated Raman spectra the most vibrations correspond to full-symmetrical, so called "breathing motion" mode. It was shown that in calculated IR absorption spectra clusters C24, C48, the most intensive vibrations correspond to the mode with radial nonsymmetrical atom displacement. In calculated Raman spectra of clusters C24, C48 the most intensive vibrations correspond to the mode with atom tangential displacement. Frequencies of optical vibration modes are displaced in low frequency range in accordance with increasing of weight of atoms in molecule. The dimension of the effect of an increase in the number of atoms in the cage crystal-forming clusters installed - the frequency shift of the tangential stretching vibrations in the side with the higher frequencies associated with the reduction bonds. Found that the calculated IR and Raman spectra of cage crystal-forming clusters BN responsible ekperimetnalnim ІЧ and Raman spectra of the so-called "E-phase" BN. It is shown that the spectra calculated IR absorption spectra, Raman spectra and vibration mode of predicated crystal-forming clusters C2n, BnNn i SinCn (n = 12, 24) i ZnnOn, GanNn (n = 12) can be used for interpretation of experimental data and identification of these clusters in the samples if the pilot receiving.

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. Покропивний Володимир Васильович
2. Pokropivny Vladimir Vasilievich

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. Дмитрук Ігор Миколайович
2. Дмитрук Ігор Миколайович

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.05

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. Іващенко Володимир Іванович
2. Іващенко Володимир Іванович

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. Новіков Віталій Володимирович
2. Новіков Віталій Володимирович

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 Фірстов Сергій Олексійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Фірстов Сергій Олексійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.