Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0421U101780

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 19-05-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Соловйов Микола Володимирович
2. Solovyov Mykola Volodymyrovych

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 01.04.18

Назва наукової спеціальності: Фізика і хімія поверхні

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 22-04-2021

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: Державний університет "Львівська політехніка"

Код за ЄДРПОУ: 02071001

Місцезнаходження: м.Львів-13, вул.С.Бандери, 12, м. Львів, Львівська обл., 79013, 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 20.051.06

Повне найменування юридичної особи: Коломийський інститут ДВНЗ "Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника"

Код за ЄДРПОУ: 25735101

Місцезнаходження: вул. Лисенка, 8, м. Коломия, Коломийський р-н., Івано-Франківська обл., 78200, 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: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79000, Україна

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, 29.31.51

Тема дисертації:

1. Трансформація енергії електронних, екситонних та фононних збуджень в кристалах гррупи A4BX6.

2. Transformation of the energy of electron, exciton and phonon excitations in A4BX6 group crystals.

Реферат/анотація:

1. Робота присвячена систематичному експериментальному і теоретичному дослідженню електронних, фононних, оптичних та електричних властивостей кристалів групи A4BX6.Монокристали Tl4HgI6 та Tl4CdI6 вирощувались з використанням вертикального методу Бріджмена. Для цього попередньо бінарні сполуки TlI і HgI2, брали в співвідношеннях, відповідних формулі хімічної сполуки та завантажували в подвійну кварцову ампулу з відтягнутим у формі конуса дном. На основі порошкової Х- променевої дифракції встановлено основні структурні параметри елементарної комірки досліджуваних сполук. Одержані структурні параметри, в подальшому, використовуються для теоретичних розрахунків.Приводяться результати першопринципних розрахунків електронного-енергетичного спектру, фононного-енергетичного спектру та оптичних параметрів кристалів Tl4CdI6 та Tl4HgI6. На основі теоретичних розрахунків визначено ефективні маси електрона і дірки, виявлено локалізацію найменшої забороненої щілини, з'ясовано генезис зони провідності

та валентної зони, ідентифіковано природу прямо зонного переходу.Представлені результати теоретичних розрахунків фононних спектрів кристалів групи A4BX6. За кімнатної температури кристали описуються центросиметричною тетрагональною просторовою групою симетрії P4/mnc. На основі теоретико-групового аналізу здійснена симетрійна класифікація фононних мод. Зокрема встановлено розподіл коливань досліджуваного монокристала за класами симетрії, а також визначено правила відбору для коливань інфрачервоних спектрів та спектрів комбінаційного розсіювання.Для підтвердження теоретичних розрахунків подаються результати експериментальних досліджень спектрів комбінаційного розсіювання та інфрачервоних спектрів поглинання кристалів Tl4CdI6 та Tl4HgI6. На основі теоретико-групового аналізу зроблено симетрійну класифікацію фононних мод. Зокрема встановлено розподіл коливань досліджуваного монокристала за класами симетрії, а також визначено правила відбору коливань для інфрачервоних спектрів та спектрів комбінаційного розсіювання. За спектрами комбінаційного розсіювання ідентифіковано положення смуг та зроблено припущення про їх походження. Результати температурної поведінки спектрів фотолюмінесценції кристалів Tl4CdI6 та Tl4HgI6. Дослідження спектрів свічення проведено в температурному діапазоні 4.5-300 K та спектральному діапазоні 350-650 нм. Виявлено дві основні смуги свічення ~ 551 нм та ~ 448 нм (для кристалу Tl4HgI6), які відповідають свіченням домішкових центрів HgI2 та TlI відповідно. Припускається, що низькотемпературна смуга свічення ~ 523 нм відповідає рекомбінації екситонної смуги. Прояв різких смуг в діапазоні 350-410 нм відносяться до фононних повторень. На основі досліджень спектрів ФЛ для кристалу Tl4CdI6 за низьких температур (77 K) було виявлено три основні смуги 379.3, 415.4 та 457.4 нм. Природа прикрайових смуг (415.4 і 457.4 нм) характеризується однаковими положенням смуг в спектрах збудження. Природа всіх смуг у спектрах збудження можна пояснити, використовуючи частину щільності станів талію, кадмію та індію. Виявлено, що смуги (3.71, 4.94 еВ) спектрів збудження можуть формуватись s – p переходами в Tl компоненті. Припускається, що смуга 2.96 еВ виникає за рахунок свічення в з'єднанні CdI6, вона може відповідати s – p переходам. Отже, смуга ФЛ 457.4 нм та 415.4 нм викликана внутрішніми переходами 6s – 7p в Tl та в з'єднанні CdI6.

2. The work is devoted to the systematic experimental and first principles investigation of electronic, phonon, opticaland electrical properties of A4BX6 group crystals.The synthesis of the investigated compound is performed by the vertical Bridgmantechnique. The high-frequency binary compounds TlI and HgI2 are used as the input agents. The initial components were taken according to equi-molar ratios. Preliminary purification of the salts was performed using reiterated recrystallisation from the melt in quartz ampoules, and a vacuum sublimation.The structure data, atomic coordinates and interatomic distances calculation are based on experimental X-ray diffraction data.The energy band structure of Tl4CdI6 and Tl4HgI6 is calculated from the first principles within the generalized gradient approximation (GGA). The band structure and density of states were calculated using a pseudopotential method in the framework of density functional theory. The effective mass of an electron and a hole have been determined using the first-principle calculations of band energy structure. The experimental and theoretical results are in good agreement.Structure data and atomic coordinates have been obtained by Rietveld method. The compounds of Tl4HgI6 and Tl4CdI6 are isomorphs with each other and crystallize in a tetragonal lattice with the space group of P4/mnc. Present the results of theoretical calculations of phonon spectra of A4BX6 group crystals. Based on group theory analysis the symmetry classification of phonon modes carried out. Moreover the distribution of vibrations for symmetry classes of single crystals and the selection rules for vibrations in the IR- and Raman spectra are obtained.The results of the infrared and Raman spectra of Tl4HgI6 and Tl4CdI6 crystals are present. On the basis of a factor group analysis and phonon frequencies calculated for Tl4HgI6 and Tl4CdI6, the relations between the vibrational spectra and the crystal structures have been determined. Moreover, the distribution of vibrations for symmetry classes of single crystals and the selection rules for vibrations in the infrared absorption and Raman spectra are obtained. Phonon modes frequencies and their origin determination are based on Raman scattering data.

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. Франів Андрій Васильович

2. Franiv Andriy Vasylovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.01

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. Коцюбинський Володимир Олегович

2. Kotsiubynskyi Volodymyr Olehovych

Кваліфікація: д.ф.-м.н., 01.04.18

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. Падляк Богдан Володимирович
2. Padliak Bohdan Volodymyrovych

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 Остафійчук Богдан Костянтинович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Остафійчук Богдан Костянтинович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

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