

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0412U002672

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 31-05-2012

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Когут Зіновій Олександрович

2. Kohut Zinoviy Olexandrovych

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** кандидат наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 01.04.10

**Назва наукової спеціальності:** Фізика напівпровідників і діелектриків

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** Не застосовується

**Дата захисту:** 20-04-2012

**Спеціальність за освітою:** 7.070101

**Місце роботи здобувача:** Національний університет "Львівська політехніка"

**Код за ЄДРПОУ:** 02071010

**Місцезнаходження:** 79013, Україна, м.Львів, вул. С.Бандери, 12

**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 35.051.09

**Повне найменування юридичної особи:** Львівський національний університет імені Івана Франка

**Код за ЄДРПОУ:** 02070987

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

**Форма власності:**

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

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

### **V. Відомості про дисертацію**

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 29.19.33

**Тема дисертації:**

1. Електронна поляризованість одновісно навантажених кристалів  $K_2ZnCl_4$  з несумірною фазою.
2. The electron polarizability of uniaxially stressed  $K_2ZnCl_4$  crystals with the incommensurate phase.

**Реферат:**

1. Дисертація присвячена дослідженню баричних залежностей показників заломлення, двоприменезаломлення, положення точок фазових переходів, що охоплюють несумірну фазу та кристалооптичних параметрів діелектричного фероїка  $K_2ZnCl_4$  в ділянці температур (293–700 K); апроксимації  $n_i(T, \lambda, \sigma)$  формулою Зельмейера; розрахунку параметрів ефективних ультрафіолетових та інфрачервоних осциляторів, електронної поляризованості, рефракцій та оптичних постійних механічно вільних і навантажених одновісними тисками діелектричних кристалів  $K_2ZnCl_4$ . Використано інтерференційну методику досліджень у поляризованому світлі та метод Обреїмова. Визначено параметри оптичних індикатрис, розраховано параметри ефективних осциляторів, оптичні константи та їхню баричну чутливість. Виявлені зміни пов'язано зі структурою кристалів, запропоновано використання результатів роботи у вимірювальній техніці, в т.ч. у термометрії. Встановлено, що показники заломлення кристалів зростають під впливом одновісних тисків, що зумовлено зміщенням спектрів поглинання в довгохвильову ділянку спектра. Виявлено, що одновісні тиски зміщують точки ФП з пара- в несумірну та

сумірну сегнетоелектричну фази в різні температурні ділянки, що спричинено впливом одновісного тиску на структуру кристала, а саме орієнтацію тетраедрів. На підставі ab-initio розрахунків зонної електронної структури, густини станів та оптичних функцій кристала  $K_2ZnCl_4$  встановлено, що ширина забороненої зони становить  $E_g = 4,85$  eV і сформована переважно  $ZnCl_4$ -комплексами. Показано, що одновісні тиски зменшують ширину  $E_g$ , а величини  $dE_g/d\sigma$ , отримані з безпосередніх розрахунків зонної структури цього кристала добре узгоджуються з оціночними величинами  $dE_g/d\sigma$ , отриманими з результатів досліджень баричних змін показників заломлення.

2. The thesis is devoted to studies of spectral and temperature dependences of the refractive indices, birefringence, the piezooptic constants; the approximation  $n_i(T, \lambda, \sigma)$  with the Selmeer formula, the calculations of the parameters of effective ultraviolet and infrared oscillators, electron polarizability, refraction, as well as the optical constants of both mechanically free and uniaxially stressed dielectric crystals  $K_2ZnCl_4$ . The methods for synthesizing crystals from aqueous solutions, measuring the effect of uniaxial mechanical stresses on the birefringent properties of crystals are also represented in the thesis. The calculations on the basis of the first time ab-initio investigations of the band electronic structure, density of states and optical functions of  $K_2ZnCl_4$  crystal for the orthorhombic space group of symmetry  $Pna2_1$  were made. The valence-to-conduction band gap  $E_g = 4.85$  eV of the crystal is found to be of the direct type in the  $\Gamma$ -point of Brillouin zone and to be formed by the electronic states of  $ZnCl_4$  complexes only. One of the features of band structure of  $K_2ZnCl_4$  is a presence of separated two groups of conduction bands, which are originated from different electrons: first group, at the bottom of conduction bands, is originated mainly from  $ZnCl_4$  ions and second group of higher energies derives mainly from d-electrons of potassium. It is revealed that the  $n_i$  values mainly increase under the action of uniaxial stresses, while the corresponding increments are the largest in the ultraviolet spectral range. These facts are caused by increment of the electron polarizability, the bonds refraction and the displacement of the absorption spectra to the longwave region. The uniaxial mechanical pressure along the principal crystallophysical axes is shown to give rise to shifting the PT points towards higher or lower temperatures, depending on the influence of uniaxial pressures upon the crystalline structure. The baric coefficients of the PT shift,  $T_c/m$ , are determined for those crystals.

**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 ОПВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

## **VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Стадник Василь Йосифович

2. Stadnyk Vasyl Josyfovych

**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

## **VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів**

### **Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Половинко Ігор Іванович

2. Половинко Ігор Іванович

**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. Грабар Олександр Олексійович

2. Грабар Олександр Олексійович

**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**

Вакарчук Іван Олександрович

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

Вакарчук Іван Олександрович

**Відповідальний за підготовку  
облікових документів**

**Реєстратор**

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



Юрченко Т.А.