

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0821U103005

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 28-12-2021

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**



## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Матвіїв Роман Богданович

2. Matviiv Roman Bohdanovych

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** доктор філософії

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 105

**Назва наукової спеціальності:** Прикладна фізика та наноматеріали

**Галузь / галузі знань:**

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

**Дата захисту:** 22-12-2021

**Спеціальність за освітою:** Фізика та астрономія

**Місце роботи здобувача:** 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

### **III. Відомості про організацію, де відбувся захист**

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** ДФ 35.051.038

**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

### **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:** 29.19.19, 29.19.33, 29.31.51

**Тема дисертації:**

1. Вплив домішок на оптико-електронні параметри діелектричних кристалів групи сульфатів
2. The influence of impurities on the optical and electronic parameters of sulfate group dielectric crystals

**Реферат:**

1. У роботі синтезовано кристали сульфату (СК) калію з концентрацією домішки іонів міді 1,7 та 3%. Досліджено структуру домішкових кристалів методом X-променевої порошкової дифракції. Встановлено, що цю структуру можна розглядати як результат кратного (два атоми калію на один атом міді) гетеровалентного заміщення. Уперше проведено дослідження дисперсійних залежностей показників заломлення імерсійним методом Обреїмова у спектральному діапазоні 300...700 нм для кристалів сульфату калію із концентрацією домішки 1,7 % та 3%, відповідно для трьох кристалофізичних напрямків. Встановлено, що введення домішки призводить до зменшення абсолютних величин показників заломлення і не змінює характеру їх дисперсії. Досліджено спектральні (300...700 нм) залежності двозаломлення спектроскопічним методом кристалів сульфату калію з домішкою іонів міді у концентраціях 1,7 % та 3 %, відповідно. Досліджено вплив одновісного навантаження та температури на двозаломлення. Встановлено, що введення домішки змінює абсолютні величини двозаломлення. Також встановлено, що одновісні навантаження змінюють величину абсолютних значень двозаломлення. У кристалах СК з домішкою іонів міді виявлено виникнення двох ізотропних точок.

Показано, що введення домішок призводить до зміщення ізотропних точок у бік нижчих температур, порівняно із чистим кристалом. Побудовано узагальнені температурно-спектрально-баричні діаграми ізотропного стану домішкових кристалів СК, що може мати практичне значення при використанні даного кристала у якості кристалооптичного датчика. Проведено дослідження термічного розширення, диференціального термічного аналізу та двозаломлення кристалів сульфату калію із домішками іонів міді у температурному діапазоні, що охоплює точку фазового переходу. Показано суттєву зміну величини стрибка під час ФП та зміщення точки ФП у бік нижчих температур. Досліджено величини комбінованих і абсолютних п'єзооптичних коефіцієнтів домішкових кристалів СК. Виявлено їх незначне зменшення порівняно з чистим кристалом, що свідчить про збільшення механічної жорсткості домішкових кристалів. Проведено розрахунки зонно-енергетичної структури кристалів сульфату калію із домішкою міді концентрацією 3% з використанням теорії функціоналу густини. З'ясовано, що у забороненій зоні присутні рівні d-електронів міді які внаслідок дії кристалічного поля знімають їх виродження. Проведено дослідження X-променевих фотоелектронних та X-променевих емісійних спектрів домішкового кристала СК. Показано, що експериментальні результати добре узгоджуються із результатами теоретичних розрахунків зонно-енергетичної структури. Запропоновано використовувати ізоморфний кристал  $K_{1.75}[NH_4]_{0.25}SO_4$  у якості термочутливого елемента у пристрої для вимірювання температури. Також запропоновано використовувати кристал фторберилату амонію у якості п'єзооптичного елемента у пристрої для вимірювання тиску.

2. Potassium sulfate (PS) crystals doped with copper ions with concentrations of impurity of 1.7% and 3% were synthesized. The structure of impurity crystals was studied by the X-ray powder diffraction method. It is established, that it can be considered as a result of multiple (two potassium atoms per copper atom) heterovalent substitution. Dispersions of refractive indices of potassium sulfate crystals doped with copper ions with the 1.7 and 3% impurity concentration are studied for the first time by the Obreimov method in the spectral range 300... 700 nm and for three principal crystal optics directions. It is established that the introduction of impurity leads to a decrease in the absolute values of the refractive indices and does not change the nature of the dispersion. The spectral (300... 700 nm) dependences of birefringence of potassium sulfate crystals doped with copper ions with different concentrations of impurity (1.7 and 3%) are investigated by the spectroscopic method. The influence of uniaxial pressures and temperature changes on birefringence is investigated. It is established that the introduction of impurity changes the absolute values of birefringence. It is also established that uniaxial pressure changes the magnitude of the absolute values of birefringence. It is found the presence of two birefringence-sign-inversion points in doped with copper ions PS crystals. It is shown that the introduction of impurity leads to the shift of birefringence-sign-inversion points towards low temperatures if compared with that of pure crystal. Generalized temperature-spectral-baric diagrams of the isotropic state of doped with copper ions PS crystals are constructed, which may be of practical importance when using this crystal as a crystal-optical sensor. The study of thermal expansion, differential thermal analysis, and birefringence of potassium sulfate crystals doped with copper ions is carried out in the wide temperature range, covering the phase transition point. The values of the combined and absolute piezooptical coefficients of doped PS crystals are investigated. Slight decrease of the coefficients in comparison with that of pure crystal was revealed, which indicates an increase in the mechanical stiffness of impurity crystals. Calculations of the band-energy structure of PS crystals doped with copper ions with the 3% impurity concentration were performed using density functional theory. It was found that there are levels of copper d-electrons in the band gap, which remove their degeneration due to the action of the crystal field. In order to confirm the calculated band-energy structure, the X-ray photoelectron and X-ray emission spectra of the PS crystals doped with copper were studied. The experimental results have confirmed the results of theoretical calculations of the band-energy structure. It is proposed to use the  $K_{1.75}[NH_4]_{0.25}SO_4$  crystal as a thermosensitive element in a device for measuring temperature. It is also proposed to use the ammonium beryllium fluoride crystal as a piezoelectric element in the pressure measuring device.

**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 Yosifovych

**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

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

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Скаб Ігор Петрович

2. Skab Ihor Petrovych

**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. Столярчук Ігор Дмитрович

2. Stoliarchuk Ihor Dmytrovych

**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**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Демків Тарас Михайлович

2. Demkiv Taras Mykhailovych

**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. Оленич Ігор Богданович

2. Olenych Ihor Bohdanovych

**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

## VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
голови ради

Вістовський Віталій Володимирович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові  
головуючого на засіданні

Вістовський Віталій Володимирович

Відповідальний за підготовку  
облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є  
відповідальним за реєстрацію наукової  
діяльності



Юрченко Т.А.