Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0418U003480

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 30-10-2018

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Стахура Володимир Богданович
2. Stakhura Volodymyr

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: 17-10-2018

Спеціальність за освітою: Фізика конденсованого стану

Місце роботи здобувача: 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

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: вул. Університетська 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: 29.19.33

Тема дисертації:

1. Оптико-електронні властивості одновісно затиснутих несумірно модульованих кристалів Rb2ZnCl4

2. The optoelectronic properties of uniaxially clamped incommensurate modulated Rb2ZnCl4 crystals

Реферат/анотація:

1. У роботі досліджено температурні, спектральні й баричні залежності двопроменезаломлення □ni та показників заломлення ni(□) кристалів Rb2ZnCl4. Встановлено значну баричну чутливість □ni і ni. Показано, що одновісне стискання не змінює характеру кривих ni(□) і ni(T), а тільки величини dni/d□ та dni/dT. Розраховані баричні залежності електронної поляризовності □i, рефракції R та параметрів УФ осциляторів (□0i, B1i) та виявлено їх баричну зміну. Установлено, що одновісні напруження зміщують положення точок ФП по температурній шкалі у різні напрями залежно від напряму стискання. Побудовано фазову температурно-баричну діаграму кристала Rb2ZnCl4. Використовуючи баричні залежності □ni, досліджено спектральні й температурні залежності п'єзооптичних констант . Розраховано зонну структуру кристалів Rb2ZnCl4. Встановлено, що валентна зона володіє слабкою дисперсією у k-просторі, тоді як зона провідності – значною дисперсією, а область найвищої дисперсії зон локалізована поблизу центру зони Бріллюена (точка Г). Визначено значення найменшої прямої забороненої щілини. Розраховано атомну заселеність складових компонент, довжину і ступінь заселеності найкоротших атомних зв'язків в кристалі Rb2ZnCl4. На основі

залежностей дійсної та уявної частини комплексної діелектричної проникності за допомогою дисперсійних співвідношень Крамерса–Кроніга розраховано спектральні залежності ni(□) і Δni та проведено їх порівняння з експериментальними даними. Встановлено, що дисперсія (∂n/∂□ < 0) та характер анізотропії (na > nc > nb) зберігається однаковими в обох випадках.

2. In the work the temperature, spectral and pressure dependences of birefringence □ni of Rb2ZnCl4 crystals have been studied and the dependence of birefringence from uniaxial pressures has been found. The latter induce a new isotropic state in the crystal. Using the pressure dependences, the spectral and temperature dependences of the piezooptical coefficients are investigated. It has been found that they have small dispersion dependence and significant anomalies at phase transition temperature Tc = 192 K. It has been obtained that the uniaxial stresses shift the temperature of phase transitions on the temperature scale in different directions depending on the direction of compression. The temperature-pressure phase diagram of the crystal has been constructed. From which it has been found that incommensurate phase disappear and paraelectric- ferroelectric phase transition occurs at the pressure □c □ 18,3 □0,5 kbar and the temperature T □ 28,3 □ 0,1 K. The spectral, temperature and pressure dependences of the refractive indices ni(□) have been studied and it has been shown that the uniaxial compression does not change the properties of curves ni(□) and ni(T), but change the quantities dni/d□ and dni/dT. Pressure dependences of electron polarization □i,, refraction R and parameters of ultraviolet oscillators (□0i, B1i) have been calculated. It has been found that the uniaxial compression increases Ri and □i. It was shown that increasing of ni because of the uniaxial pressure was mainly due to increasing of refractions (~65%) because of the change of band gap Eg and the long-wave shift of the ultraviolet absorption band maximum and the density of effective oscillators (~ 35%) of the Rb2ZnCl4 crystal. The band structure of Rb2ZnCl4 crystals has been calculated using two approximation of the exchange-correlation potential (generalized gradient approximation (GGA) and local density (LDA)) in the basis of plane waves. It has been found that energy levels of valence band have weak dispersion in the k-space, while the energy levels of conduction band have significant dispersion. The highest dispersion of energy states is localized near the center of the Brillouin zone, at Γ point. The value of the smallest direct band gap (at Γ point) has been determined. In the conduction band, 4 subbands has been found. The subbands are mainly formed by s-states of Rubidium and Zinc. These states are localized near the Z point of the Brillouin zone and hybridized with the p-states of Chlorine. The atomic population of the components, the length and degree of population of the shortest atomic bonds in the Rb2ZnCl4 crystal have been calculated. It has been shown that the maximum population of Zn-Cl bond in ZnCl4 tetrahedron is 0.56, which confirms the high covalence of Zn-Cl bonds. On the basis of the dependences of the real and imaginary parts of the complex dielectric permittivity, using the Kramers-Kronig dispersion relations, the spectral dependences of the refractive indices ni(□) and birefringence Δni have been calculated and compared with experimental data. It has been established that the dispertion (∂n/∂□ < 0) and the character of anisotropy (na > nc > nb) remain the same in both cases.

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. Курляк Василь Юрійович

2. Kurlyak Vasyl

Кваліфікація: к. 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. Убізський Сергій Борисович

2. Ubizskii Sergiy

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

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сливка Олександр Георгійович

2. Slivka Aleksandr

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	Вакарчук Іван Олександрович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Павлик Богдан Васильович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.