Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U002642

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 03-06-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Щепанський Павло Андрійович
2. Shchepanskyi Pavlo A.

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: 14-05-2019

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: 27.35.38, 29.19.31

Тема дисертації:

1. Особливості зонної структури та оптичні характеристики кристалів групи ABSO4 (де A, B = Li, Na, K, NH4) з ізотропною точкою

2. Band structure peculiarities and optical characteristics of the ABSO4-group crystals (where A, B = Li, Na, K, NH4) with an isotropic point

Реферат/анотація:

1. Робота присвячена першопринципним розрахункам зонно-енергетичної структури та густини електронних станів, а також експериментальному та теоретичному дослідженню дисперсійних залежностей рефрактивних параметрів діелектричних кристалів літій-натрій сульфату та твердого розчину калій-амоній сульфату, їх змінам під впливом зовнішніх полів і внаслідок часткового та повного катіонного заміщення. Синтезовано та досліджено методом X-променевої дифракції структуру кристалів LiNaSO4 та K1,75(NH4)0,25SO4. Проведено аналіз структурних даних в рамках наближення другого координаційного оточення та встановлено особливості впливу часткового та повного катіонного заміщення на координаційне оточення аніонів. Вперше досліджено дисперсійні залежності показників заломлення n(□) кристалів LiNaSO4 та K1,75(NH4)0,25SO4. Порівняння оптичних властивостей ізоморфних кристалів показало, що повне катіонне заміщення K+ □ Na+ не змінює характеру дисперсійних залежностей показників заломлення кристалів, а

тільки призводить до значного зростання двопроменезаломлення. Часткове ізоморфне заміщення K+ □ (NH4)+ (12,5%) спричиняє появу в K1,75[NH4]0,25SO4 нової ізотропної точки за кімнатної температури у близькій ІЧ ділянці спектра (□IT ≈ 1350 нм). Досліджено вплив температури та тиску на двопроменезаломлення кристалів. Виявлено дві нові ІТ в K1,75(NH4)0,25SO4, які зміщені порівняно з відповідними для чистого сульфату калію в бік нижчих температур. З використанням теорії функціонала густини проведено розрахунки зонно-енергетичної структури кристалів LiNaSO4 та K1,75(NH4)0,25SO4 та визначено повну та парціальну густини електронних станів. Досліджено вплив катіонного заміщення на електронні параметри кристалів групи ABSO4. Розраховано теоретичні спектри показників заломлення та коефіцієнтів екстинкції кристалів LiNaSO4 та K1,75(NH4)0,25SO4 та проведено їх порівняння з експериментально отриманими параметрами кристалів. Проведено кореляційний аналіз рефрактивних, електронних та структурних параметрів кристалів групи ABSO4. З'ясовано, що зі зростанням значення густини кристала усереднене значення показника заломлення головно зростає, що зумовлено збільшенням іонного радіуса катіона заміщення.

2. The work is devoted to the first-principle calculations of the band-energy structure and the density of electronic states, as well as to the experimental and theoretical study of the dispersion dependences of refractive parameters of lithium-sodium sulfate dielectric crystals and potassium ammonium sulfate solid solution; to the changes of the refractive parameters under the influence of external fields and due to partial and complete cation substitution. Crystals of the ABSO4 group, where A and B are alkaline metal cations, or the NH4 group, are of considerable interest due to the ability to undergo various phase transitions, their ferroelectric, ferroelectric, superionic, optical and other properties. Among the optical properties, an interesting feature of these crystals is the possible existence of isotropic points, when crystal undergo transition from a biaxial to a uniaxial or from an optically uniaxial to isotropic one. Such crystals can be used as temperature and pressure sensors. Using the method of evaporation from aqueous solution, single crystals of LiNaSO4 and a K1.75(NH4)0.25SO4 of good optical quality have been grown. The structure of the obtained compounds was investigated by X-ray diffraction. The analysis of structural data in the framework of the second coordination environment approximation was carried out and the peculiarities of the influence of partial and complete cation substitution on the coordination environment of the anions was determined. The dispersion dependences of the refractive indices n(□) of LiNaSO4 and K1.75(NH4)0.25SO4 crystals are established for the first time. On the basis of available literature data on the optical properties of isomorphic crystals, it was found that the complete cation substitution K+ □ Na+ (LiKSO4 □ LiNaSO4) does not change the character of dispersion changes in crystals refraction indices, but leads to a significant increase in birefringence value; partial isomorphic substitution (12.5%) K+ □ (NH4) (K2SO4 □ K1.75(NH4)0.25SO4) leads to the appearing of the point of the birefringence sign inversion at room temperature in K1.75(NH4)0.25SO4 for the near-infrared spectrum region (□IP ≈ 1350 nm). The results of the study of temperature and pressure influence on the birefringence of crystals are given. Two new isotropic points in K1,75(NH4)0,25SO4 are found at temperatures T01 □ 541 K and T02 □ 589 K, which are shifted in comparison with the corresponding ones for pure potassium sulfate towards lower temperatures. It is established that uniaxial pressures cause a different in sign birefringence changes. Herewith, the dispersion effect of birefringence increases for the LSS under the influence of the stress applied along the optical axis and weakens in a case of stress directed perpendicularly to it. Based on the birefringence changes under the action of uniaxial pressures the piezooptical coefficients dispersion is obtained. The temperature-spectral-baric diagrams of isotropic points in K1.75(NH4)0.25SO4, which determine the uniaxial state of the crystal under different temperature, pressure and spectral conditions, are constructed. Using the density functional theory, calculations of the band-energy structure of LiNaSO4 and K1.75(NH4)0.25SO4 crystals are calculated and the total and partial densities of electronic states are determined. The influence of cation substitution on electronic parameters of crystals of ABSO4 group is investigated. Theoretical spectra of refractive indices and extinction coefficients for LiNaSO4 and K1.75(NH4)0.25SO4 crystals are calculated and compared with experimentally obtained parameters of the crystals. A correlation analysis of the refractive, electronic and structural parameters of crystals of ABSO4 group was carried out. It has been found that the average value of the refractive index mainly increases with increase of crystal density, what is caused by the corresponding increase in the ionic radius of the substitutional cation.

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. Стадник Василь Йосифович
2. Stadnyk Vasyl Yo.

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. Різак Василь Михайлович
2. Rizak Vasyl M.

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. Столярчук Ігор Дмитрович

2. Stolyarchuk Ihor D.

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.