

# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0418U002156

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-02-2018

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



## II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кашуба Андрій Іванович

2. Kashuba Andrii

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: 14-02-2018

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:** 29.19.15

**Тема дисертації:**

1. Трансформація енергетичних зон та оптичних параметрів твердих розчинів заміщення галогенідів індію і талію
2. Transformation of electronic energy structures and optical parameters of substitutional solid solutions of halides indium and thallium

**Реферат:**

1. Робота присвячена систематичному експериментальному і теоретичному дослідженню структурних, електронних, оптичних та механічних властивостей твердих розчинів заміщення галогенідів індію і талію. Монокристалічні тверді розчини  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$  ( $x = 0.4-0.9$ ) було успішно синтезовано вертикальним методом Бриджмана-Стокбаргера. Вперше проведено розрахунки зонної структури на основі теорії функціонала щільності та обговорюються особливості дисперсії енергетичних рівнів. Також досліджується походження валентної зони та зони провідності. Отримано залежність відносного лінійного розширення кристалів  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$  ( $T = 300-520$  K). Виходячи з цього, знайдено температурну залежність коефіцієнта теплового розширення  $\alpha$ . Вивчено залежність двопроменезаломлення  $\Delta n$  від температури та концентрації компонента Tl в твердому розчині. Вивчені еластичні властивості твердих розчинів заміщення  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$ . Розраховано теоретично модуль Юнга, зсуву та стиснення. Аналізується залежність пружних властивостей твердого розчину  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$

від компонентного складу ( $0.375 \leq x \leq 1$ ). Швидкість поширення звуку в досліджених зразках досліджено експериментально. Отримані дані використовуються для розрахунку пружної постійної  $C_{22}$ .

2. The thesis is devoted to the systematic experimental and first principles investigation of structural, electronic, optical and mechanical properties of  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$  substitution solid solutions. A series of  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$  ( $x = 0.4 - 0.9$ ) single crystalline solid state alloys were successfully synthesized by the vertical Bridgman-Stockbarger method. For the first time the density functional theory based band structure calculations are performed and features of the band energy dispersion are discussed. Also the origin of the principal valence and conduction bands is explored. The dependence of relative linear expansion of  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$  crystals ( $T = 300-520$  K) has been obtained. Based on this, the temperature dependence of thermal-expansion coefficient  $\alpha$  has been found. Dependence of birefringence  $\Delta n_i$  on temperature and concentration of the Tl component in the solid solution has been studied. Elastic properties of substitutional solid solutions  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$  have been studied. The corresponding Young modulus, shear modulus, and compression modulus are calculated theoretically. The dependence of the elastic properties of the  $\text{In}_x\text{Tl}_{1-x}\text{I}$  solid solution on the content  $x$  within the interval  $0.375 \leq x \leq 1$  is analyzed. The velocity of sound propagation in examined specimens is studied experimentally. The obtained data are used to calculate the elastic coefficient  $C_{22}$ . Features of the photoconductivity spectra for different crystallographic directions have been discussed with taking into account the chemical bonds anisotropy. Excitation and emission spectra of the photoluminescence of synthesized  $\text{In}_{0.5}\text{Tl}_{0.5}\text{I}$  solid solution are measured and analyzed.

**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. Франів Андрій Васильович

2. Franiv Andriy

**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. Гомоннай Олександр Васильович

2. Gomonnai Alexander

**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. Бойчук Василь Іванович

2. Boichuk Vasyl

**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.