ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

Рудиша Мирона Ярославовича

«Оптико-електронні параметри кристалів літій-амоній сульфату під дією одновісних тисків»,

представлену на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків

Актуальність теми досліджень.

Про **актуальність** тематики дисертаційного дослідження свідчить її зв'язок з державними науковими програмами:

– «Нові матеріали функціональної електроніки на основі напівпровідникових та діелектричних кристалів груп A_4BX_6 та A_2BX_4» (номер державної реєстрації 0117U001231)

– «Синтез нового класу кристалічних матеріалів групи A_2BX_4 та дослідження перспектив їх ефективного застосування у приладах управління електромагнітним випромінюванням» (номер державної реєстрації 0117U007199).

Дисертаційну роботу написано згідно з вимогами до оформлення такого плану робіт. Вона містить анотацію вступ, у якому представлено актуальність та мотивацію досліджень, визначено завдання дослідження проведеного в дисертаційній роботі, п’ять розділів (у першому розділі проведено літературний огляд структури та властивостей кристалів літій-амоній сульфату, у другому описано методику отримання кристалів у двох поліморфних модифікаціях, методику експериментальних досліджень та розрахунків електронної структури, у трьох наступних викладено результати оригінальних досліджень), висновки та список цитованої літератури та додаток. Загальний обсяг дисертаційної роботи складає 178 сторінок, включаючи 92 рисунки та 26 таблиць. Список використаних джерел містить 135 найменувань.

Основні результати та їх наукова новизна

1. Досліджено рефрактивні параметри кристалів літій-амоній сульфату. Виявлено, що у кристалі α-модифікації існує ізотропна точка яка відповідає рівності показників заломлення n_x та n_z за довжини хвилі $\lambda_0 \approx 683$нм. При збільшенні температури вона рухається в короткохвильову область спектра. Незалежне дослідження кута між оптичними осями $2V$ підтвердили існування ізотропної точки у кристалі а також зміну орієнтації оптичних осей при переході через ізотропну точку.

2. Виявлено чутливість інфрачервоних смуг відбивання у діапазоні частот 800–1700 $см^{-1}$до дії механічних одновісних тисків, яка полягає у зміні інтенсивностей та положення піку смуги. Зі спектрів відбивання отримано баричні залежності оптичних сталих таких як сила осцилятора, константи затухання, частоти повздовжніх та поперечних коливань.

3. Розраховано зонно-енергетичну структуру кристалів обох модифікацій з використанням методів теорії функціонала густини. З’ясовано, що верхні рівні валентної зони володіють низькою дисперсією і сформовані 2p-електронами кисню. Дно зони провідності, з мінімумом в точці Г, сформоване s-електронами

літію та водню. Експериментальне дослідження Х-променевих фотоелектронних та Х-променевих емісійних спектрів підтвердили результати теоретичного моделювання.

4. Розраховані дисперсійні залежності показників заломлення та двопроменезаломлення досліджуваних кристалів добре узгоджуються з експериментально отриманими результатами.

Практичне значення отриманих результатів роботи полягає у тому, що приведені в дисертаційній роботі Рудиша М. Я. результати можуть бути використані з точки зору прикладної фізики, матеріалознавства та приладобудування. Виявлені у кристалах ізотропні точки а також чутливість оптичних параметрів до дії одновісного тиску а також до зміни температури, можуть бути використаними при конструюванні сенсорів тиску чи температури, що дозволить проводити безконтактне їх вимірювання. На основі результатів дослідження двопроменезаломлення запропонована можливість використання цих кристалів у якості елементів фотопружних пристроїв для модуляції світла та в якості активних елементів оптичних сенорів тиску та температури.

Обґрунтованість та **достовірність** результатів дисертаційної роботи визначається використанням апробованих експериментальних методів дослідження рефрактивних властивостей – для дослідження показників заломлення, двопроменезаломлення, та впливу на них зміни температури та дії одновісних тисків; інфрачервоної спектроскопії; аналіз дифракції Х-променів; рентгенівської фотоелектронної спектроскопії, рентгенівської емісійної спектроскопії – для розрахунків електронної структури; комп'ютерні методи розрахунку фізичних параметрів. Достовірність висновків також підтверджується апробацією роботи на міжнародних наукових конференціях та семінарах. Основні результати опубліковані в 20 роботах, серед яких 8 статей у провідних наукових фахових журналах(з них 6 статей, включених у наукометричні бази даних Scopus та Web of Science, 2 статті у фахових виданнях України) та 12 тез доповідей на міжнародних наукових конференціях та семінарах. Автореферат оформлено згідно чинних вимог і він повністю відображає зміст та основні положення дисертаційної роботи.

Зауваження до роботи

1. На ст. 112, 113 замість «п'єзооптичних коефіцієнтів» вжито «п'єзооптичні константи»; На рисунках 2.1 (ст. 52), 5.4 (ст133) підписи англійською мовою; на рис. 3.1, 3.2, по осі абсцис варто збільшити шрифт. У таблиці 3.6 для розмірність молярної рефракції R повинна бути $см^3$/моль (ст. 87).

2. Не зрозуміло, як автором враховано температурне розширення кристалів при вимірюванні температурної залежності двопроменезаломлення.

3. У роботі автор наводить результати дослідження зонної структури та подає значення ширини забороненої зони, розраховані з використанням LDA, GGA та B3LYP функціоналів. У роботі не вказано як корелює теоретично отримане значення E_g з експериментальним для кристала α-модифікації. Варто було

б провести розрахунки з використанням інших функціоналів для опису обміну і кореляції електронів, або використати DFT+U підхід. Також слід провести дослідження краю фундаментального поглинання.

4. Автором наведено результати дослідження комбінованих п'єзооптичних коефіцієнтів. Оскільки досліджувані кристали володіють анізотропією оптичних властивостей, цікавим видається дослідження абсолютних п'єзооптичних коефіцієнтів, та визначення акустооптичної добротності.

5. У роботі не наведено результати дослідження ІЧ-спектрів вільного та одновісно затиснутого кристала α-модифікації. Автору варто провести температурні дослідження поведінки інфрачервоних спектрів з метою вивчення температурно-баричної динаміки кристалічної ґратки.

Основні результати даної роботи є новими і оригінальними, а вказані зауваження жодним чином не применшують наукове і практичне значення отриманих Рудишем М. Я в дисертації результатів і не впливають на загальну високу оцінку дисертаційної роботи. Дисертаційна робота виконана на достатньо високому науковому рівні, стиль та виклад є логічними та обґрунтованими.

В цілому, робота є завершеним науковим дослідженням. Автореферат та публікації автора повністю відображають основний зміст дисертації.

Вважаю, що дисертаційна робота «Оптико-електронні параметри кристалів літій-амоній сульфату під дією одновісних тисків» за обсягом виконаних досліджень, науковою і практичною цінністю отриманих результатів у повній мірі відповідає вимогам «Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України № 567 від 24 липня 2013 року, а її автор, Рудиш Мирон Ярославович, безумовно заслуговує на присудження йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук зі спеціальності 01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків.

Офіційний опонент,
доктор фізико-математичних наук,
професор, завідувач кафедри фізики
Дрогобицького державного педагогічного
університету імені Івана Франка Пелещак Р.М.

Пелещака Р.М.