

## ВІДГУК

офіційного опонента на дисертацію Стакури Володимира Богдановича  
**«Оптико-електронні властивості одновісно затиснутих несумірно  
модульованих кристалів  $Rb_2ZnCl_4$ »,**

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

Сучасна електронна техніка, маючи вражаючі здобутки і змінюючи світ навколо людини, має також ще багато невирішених проблем, які пов'язані як з обмеженістю наших знань про електронні процеси та властивості речовини в усій їхній складності, так і з фізичними обмеженнями тих явищ, матеріалів і технологій, які експлуатуються на практиці. Тому розширення та поглиблення наших знань про електронні властивості різних матеріалів є магістральним напрямом і завданням як фундаментальної, так і прикладної науки. Причому якщо ще кілька десятиліть тому основною базою розвитку електронної техніки були напівпровідники, то зараз номенклатура матеріалів на передній лінії досліджень включає усі можливі матеріали та агрегатні стани речовини, а нові ефекти та явища шукають у, кожного разу, іншому вимірі – у неоднорідних станах, у гетерофазних чи частково розупорядкованих системах, у комбінованих впливах на речовину, у взаємозв'язаності через атомну та електронну будову механічних, електричних, оптичних, магнітних та інших властивостей.

Дисертація Стакури В.Б. присвячена з'ясуванню впливу одновісного стискання кристалів тетрахлорцинкату рубідію ( $TXClP - Rb_2ZnCl_4$ ) уздовж різних кристалофізичних осей на спектральні та температурні залежності показників заломлення та двопроменезаломлення, особливостей температурно-баричних, температурно-спектральних та барично-спектральних залежностей параметрів оптичної індикатриси кристалів  $TXClP$  з використанням методів розрахунку зонної структури та експериментальних методів дослідження характеристик рефракції. Повністю вкладаючись у вищезгадану концепцію ця

дисертація є актуальним науковим дослідженням тому, що ставить цілком чіткі завдання дослідити те, чого не було досліджено і, встановити те, що не було відоме.

Актуальність теми дослідження В.Б. Стакури підсилюється також і тим, що вона виконувалась у межах низки науково-дослідних робіт, що проводилися на кафедрі експериментальної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка, яка внесла вагомий внесок у фізику діелектричних кристалів, а дисертація, що аналізується, продовжує і розвиває один із найвідоміших наукових напрямків цієї кафедри.

Дисертація складається зі вступу, п'ятьох розділів, висновків та списку використаних літературних джерел. Загальний обсяг дисертаційної роботи складає 152 сторінки, включаючи 52 рисунки та 7 таблиць. Список використаних джерел містить 124 найменування.

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, визначено об'єкт, предмет і методи дослідження, сформульовано мету і завдання роботи, наукову новизну та практичне значення одержаних результатів, а також особистий внесок здобувача. Наведено зв'язок дисертаційної роботи з науковими темами та планами, дані про кількість публікацій автора за темою дисертації та апробацію результатів, а також відомості про структуру та обсяг дисертації.

У **першому розділі** дисертації розглянуто загальні властивості несумірних фаз (НФ). Відзначено, що характерною особливістю НФ кристалу ТХЦР є наявність солітонної структури, а також проведено аналіз літературних відомостей про оптико-спектральних параметри механічно вільних кристалів  $Rb_2ZnCl_4$ .

У **другому розділі** автор описав методики вирощування кристалів з водного стехіометричного розчину, орієнтації зразків та їх підготовку до проведення вимірювання, дослідження рефрактивних властивостей кристалів, температурних залежностей показника заломлення та товщини кристала у прохідному свіtlі.

У **третьому розділі** наведено результати досліджень впливу одновісного тиску на двопроменезаломлення кристалів ТХЦР. Установлено, що воно чутливе до дії одновісних тисків уздовж головних кристалофізичних напря-

мів і менш чутливе до дії тисків вздовж бісектрис між ними. Аномальна поведінка двопроменезаломлення при фазових перетвореннях (ФП) з параелектричної в несумірну і з несумірної в сегнетоелектричну фазу, дозволяє дослідити положення точок ФП при стисканні кристала. Установлено, що положення точок ФП досліджуваних кристалів достатньо чутливе до дії одновісних тисків, а також, що їхнє достатньо суттєве зміщення у температурній шкалі відбувається у різні боки залежно від напряму стискання. Останнє дало можливість передбачити виникнення ізотропного стану кристалу за певного тиску в напрямку осі  $a$ . У цьому ж розділі за температурними і спектральними залежностями двопроменезаломлення під впливом тиску отримано п'єзооптичні константи ТХЦР.

У четвертому розділі подано результати дослідження явища рефракції, зокрема залежності показника заломлення кристалів ТХЦР від одновісного стиску, його спектральні та температурні залежності. Установлено, що дисперсія  $n(\lambda)$  одновісно затиснутих кристалів, як і механічно вільних, є нормальнюю, і з наближенням до краю поглинання різко зростає. Розраховано баричні зміни кристалооптичних параметрів: електронної поляризовності  $\alpha$ , рефракції  $R$ , положення максимуму смуг поглинання УФ та ІЧ осциляторів, які визначають дисперсію, а також баричні зміни ширини забороненої зони.

У цьому ж розділі проведено феноменологічний аналіз рефрактивних параметрів кристалів  $Rb_2ZnCl_4$  та оцінено внески від термооптичного, квадратичного електрооптичного, пружно-оптичного та параметра порядку у зміни показника заломлення. Автором визначено критичний індекс температурної залежності параметра порядку, який приблизно відповідає значенню, що випливає з теорії Ландау для ФП. Проаналізовано ступінь анізотропії показника заломлення і її зв'язок зі зростанням кількості солітонів та їх закріплення на дефектах кристалічної гратки кристала.

У п'ятому розділі проведено розрахунки зонної структури кристалів з використанням двох апроксимацій обмінно-кореляційних потенціалів (GGA і LDA) у базисі плоских хвиль та досліджені особливості зон та оптичних переходів. Встановлено, що зони валентного комплексу мають слабку дисперсію у  $k$ -просторі, тоді як зони провідності – значну дисперсію. На основі залежностей дійсної та уявної частини комплексної діелектричної проникності

за допомогою дисперсійних співвідношень Крамерса–Кроніга розраховані спектральні залежності показників заломлення, поглинання та двопроменезаломлення і показано їх хороше узгодження.

У **висновках** узагальнено та сформульовано основні результати досліджень дисертації.

**Найважливішими науковими результатами дисертації** слід вважати такі:

- вперше виявлену значну баричну деформацію оптичної індикатриси кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ ;
- встановлено, що показники заломлення і двопроменезаломлення кристала є чутливими до одновісних механічних тисків уздовж різних кристалофізичних осей;
- передбачається, що під дією тиску, прикладеного вздовж осі  $a$ , можна індукувати ізотропний стан кристала ТХЦР;
- вперше встановлено вплив одновісного механічного тиску на точки фазових переходів кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ , а також умови, за яких у кристалі може зникнути несумірна фаза і матиме місце ФП з параелектричної безпосередньо у сегнетоелектричну фазу;
- розраховано спектральні й температурні залежності п’єзооптичних констант; встановлено баричні залежності електронної поляризовності, рефракції та параметрів УФ осциляторів кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ ;
- вперше проведено першопринципні розрахунки зонно-енергетичної структури, густини електронних станів та оптичних параметрів кристалів ТХЦР і встановлено їхні особливості.

**Практичне значення отриманих результатів** полягає у тому, що воно є цінними відомостями з вибору матеріалів для елементів оптоелектроніки та оптичних сенсорів і реперів тиску і температури, а також є підґрунтам для наступних.

Наукові положення дисертації є обґрунтованими як і основні результати, відображені у висновках. Достовірність результатів дисертаційної роботи забезпечена застосуванням добре апробованих експериментальних інтерференційних методів визначення показників заломлення та двопроменезаломлення; поляризаційно-оптичного та інтерференційного методів визначення

п'єзооптичних констант; теоретичних моделей для розрахунку фізичних параметрів (зонної структури, параметрів формули Зельмейєра, оптичних констант), порівнянням отриманих результатів з відомими, а також несуперечливістю отриманих результатів існуючим уявленням.

Загалом дисертація Стакури В.Б. є завершеним науковим дослідженням, яке має чітке спрямування на вирішення актуальної наукової задачі встановлення впливу одновісного стиснення на, перш за все, межі існування несумірної фази та рефракційні властивості кристалів ТХЦР. У ній отримані низку нових наукових знань, що мають також і практичну цінність. Основні результати роботи опубліковані у 8 статтях, з яких 6 індексуються у наукометричних базах даних *Scopus* та *WoS*. Вони також доповідалися та апробовані на наукових конференціях та семінарах. Робота і автoreферат оформлено згідно чинних вимог, а автoreферат відображає зміст та основні положення дисертації.

Водночас дисертація Стакури В.Б. має деякі недоліки і тому до неї слід зробити такі **зауваження і побажання**:

1. Автором проведено розрахунки зонно-енергетичної структури тільки для ненавантаженого кристала. Керуючись темою дисертаційної роботи та завданнями дослідження (ст. 12) необхідно було б провести такі розрахунки і для одновісно затиснутих кристалів.
2. Цікавими і яскравими є результати передбачення існування при стисканні ізотропного стану кристалу ТХЦР та потрійної точки при зникненні несумірної фази, однак автор не аналізує, наскільки реалістичні ці передбачення. Адже у першому випадку розрахований тиск у 587 кбар є достатньо високим і при значно менших тисках може відбутися зміна кристалічної структури або механічне руйнування кристала. У другому випадку температура 27,3 К, за якої при тиску 18,3 кбар має зникнути несумірна фаза є нижчою, за температуру переходу кристалу ТХРЦ у моноклінну структуру, що ставить під сумнів реалістичність передбачення.
3. У дисертаційній роботі недостатньо приділено уваги висвітленню можливого практичного використання отриманих результатів, зокрема слід було б докладніше описати принципи застосування кристала  $Rb_2ZnCl_4$  як сенсора температури і тиску.

- У роботі містяться деякі недоліки подання матеріалу, наприклад, криві на Рис. 5.7 дисертації (Рис. 5 автореферату), що зображають розраховані та експериментальні дисперсійні залежності показника заломлення ТХЦР, слід було б для їхнього порівняння подати на одному рисунку або, хоча б, в одному масштабі осей.
- У дисертації міститься невелика кількість орфографічних, синтаксичних, стилістичних помилок та описок.

Тим не менше, вказані зауваження і побажання жодним чином не при-меншують наукове значення отриманих в дисертації результатів і не вплива-ють на загальну високу оцінку дисертаційної роботи Стакури В.Б.

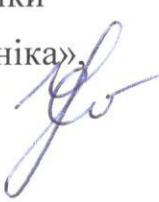
Вважаю, що дисертаційна робота «Оптико-електронні властивості одновісно затиснутих несумірно модульованих кристалів  $Rb_2ZnCl_4$ » за обсягом виконаних досліджень, науковою і практичною цінністю отриманих резуль-татів у повній мірі відповідає вимогам «Порядку присудження наукових сту-пенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника», за-твердженого постановою Кабінету Міністрів України № 567 від 24 липня 2013 року, а її автор, Стакура Володимир Богданович, безумовно заслуговує на присудження її наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук зі спеціальності 01.04.10 – фізики напівпровідників і діелектриків.

Офіційний опонент

професор кафедри напівпровідникової електроніки

Національного університету «Львівська політехніка»,

доктор фізико-математичних наук, професор



Убізький С.Б.

*Підпись проф. Убізького С.Б. засвідчує*

- 1 Вчений секретар Національного університету  
«Львівська політехніка», к.т.н., доцент



Брилинський Р.Б.

