

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ  
ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА

**Стахура Володимир Богданович**

УДК 535.323, 535.35, 537.226, 548.0

**ОПТИКО-ЕЛЕКТРОННІ ВЛАСТИВОСТІ ОДНОВІСНО ЗАТИСНУТИХ  
НЕСУМІРНО МОДУЛЬОВАНИХ КРИСТАЛІВ  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$**

01.04.10 - фізика напівпровідників і діелектриків

Автореферат  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Львів – 2018

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана на кафедрі експериментальної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України

**Науковий керівник:** кандидат фізико-математичних наук, доцент  
**Курляк Василь Юрійович**  
проректор Львівського національного університету імені Івана Франка, доцент кафедри експериментальної фізики

**Офіційні опоненти:** доктор фізико-математичних наук, професор  
**Сливка Олександр Георгійович**  
перший проректор ДВНЗ «Ужгородський національний університет», професор кафедри оптики

доктор фізико-математичних наук, професор  
**Убізький Сергій Борисович**  
професор кафедри напівпровідникової електроніки Національного університету «Львівська політехніка»

Захист відбудеться "17" жовтня 2018 року о 15:00 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д. 35.051.09 при Львівському національному університеті імені Івана Франка за адресою: 79005, м. Львів, вул. Кирила і Мефодія, 8.

З дисертацією можна ознайомитися у бібліотеці Львівського національного університету імені Івана Франка (79005, м. Львів, вул. Драгоманова, 5) та на веб-сторінці <http://physics.lnu.edu.ua/research/zahysty-dysertatsij>.

Автореферат розісланий "14" вересня 2018 року.

Учений секретар  
спеціалізованої вченої ради,  
доктор фіз.-мат. наук, професор



А.А. Ровенчак

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Нелінійні діелектричні кристали останнім часом широко застосовують в якості елементів нелінійної оптики; для запису, відтворення та обробки інформації; як індикатори фізичних полів та генератори ультразвуку. Використання цих кристалів ґрунтується в основному на їхній анізотропії і пов'язаних з нею низці властивостей, що не проявляються в ізотропних кристалічних чи аморфних середовищах. На цих матеріалах недавно відкрито нові явища, досліджуються фазові переходи (ФП) оптичними методами.

У даній дисертаційній роботі ставилось питання про дослідження зміни електронної поляризованості кристалу тетрахлорцинкату рубідію (ТХЦР)  $Rb_2ZnCl_4$  в широкому спектральному і температурному діапазонах, а також внаслідок дії одновісного тиску. Відомо, що електронна підсистема кристалів є визначальною за низку їхніх фізичних властивостей – надпровідність, магнетизм, хімічний зв'язок тощо. Вплив зовнішніх чинників на електронну підсистему кристалів та її реакції досліджені однобоко, що зумовлено її інтегральною залежністю від багатьох факторів (осциляторів).

Останнім часом активно досліджують параметричні ефекти та вплив зовнішніх чинників (електромагнітні поля, гідростатичні тиски, радіаційне й ультрафіолетове опромінення) на фізичні властивості кристалів з інверсією знаку двопронезаломлення (ІЗД). Температурно-спектральні діаграми ІЗД було запропоновано використати для задання і вимірювання температури та створення реперних температурних точок. Ці роботи започатковані у Львівському національному університеті імені Івана Франка. Поряд з пошуком нових кристалів досліджувались відомі кристали на стійкість точки ІЗД щодо відпалу зразків, термоциклювання, впливу домішок, дефектів і зовнішніх полів. Важливим є пошук нових кристалів, які б охоплювали ще не освоєні області температур, доступні ділянки спектру, були дешевими та зручними технологічно.

У даній роботі об'єктом дослідження обрано один з класичних сегнетоелектриків – кристал  $Rb_2ZnCl_4$ . Попередньо досліджено спектральні залежності двопронезаломлення та показників заломлення механічно вільного кристалу. Відомостей щодо впливу одновісного механічного тиску на температурні й спектральні залежності показників заломлення, двопронезаломлення, а також поведінку ФП немає. Тому цікаво встановити вплив одновісних тисків уздовж різних кристалофізичних осей впливають на спектральні та температурні зміни показників заломлення та

двопроменезаломлення; можливість індукування ізотропного стану; а також особливості температурно-баричних, температурно-спектральних та барично-спектральних залежностей параметрів оптичної індикатриси.

Завданням даної роботи було дослідження впливу одновісних механічних тисків на оптико-спектральні властивості у видимій ділянці спектру; можливість індукування ізотропного стану та перехресні температурно-баричні зміни властивостей кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ .

**Зв'язок з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота безпосередньо пов'язана з держбюджетними фундаментальними дослідженнями, які проводились в лабораторіях кристалооптики та вакуумного ультрафіолету Львівського національного університету імені Івана Франка за проектами Міністерства освіти і науки України:

- «Рефрактивні параметри монокристалічних і нанорозмірних фероїків під впливом зовнішніх полів» (2012 – 2015 рр.), яку виконували без фінансування у межах робочого часу викладачів ;

- ФзФ-53 «Нові матеріали функціональної електроніки на основі напівпровідникових та діелектричних кристалів груп  $\text{A}_4\text{BX}_6$  та  $\text{A}_2\text{BX}_4$ » (номер державної реєстрації 0117U001231, 2017-2019 рр.);

- Ф76/77-2017 «Синтез нового класу кристалічних матеріалів групи  $\text{A}_2\text{BX}_4$  та дослідження перспектив їх ефективного застосування у приладах управління електромагнітним випромінюванням» (номер державної реєстрації 0117U007199, 2017-2018 рр.).

- «Багатоколірні люмінесцентні наномаркери для біомедичних досліджень» (номер державної реєстрації 0116U008071, 2016-2018 рр.).

**Мета дисертаційної роботи:** Встановлення природи параметричних ефектів та особливостей зонної структури діелектричних кристалів.

- **Об'єкт дослідження:** діелектричні кристали  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ .

- **Предмет дослідження:** процеси трансформації оптико-електронних параметрів, зонно-енергетична структура діелектричних кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  за умов одновісних тисків.

Для досягнення цієї мети потрібно було вирішити наступні основні завдання:

1. Синтезувати кристали  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  та встановити їхню просторову симетрію.
2. З'ясувати вплив одновісного механічного навантаження на температурні та спектральні залежності двоприменезаломлення кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ .

3. Вивчити вплив одновісного механічного навантаження на температурні та дисперсійні залежності показників заломлення; розрахувати параметри їх ефективних ультрафіолетових (УФ) та інфрачервоних (ІЧ) осциляторів, електронну поляризованість та рефракції.
4. Визначити баричні зміщення точок фазових переходів параелектрична-несумірна-сумірна фази досліджуваних кристалів.
5. Встановити спектральні та температурні зміни п'єзооптичних коефіцієнтів в околі точок ФП.
6. Розрахувати та вивчити вплив одновісного навантаження на зонно-енергетичну структуру кристалів.
7. Проаналізувати отримані результати з метою встановлення можливості практичного застосування.

У роботі використано такі **методи дослідження**: вирощування кристалів з водного розчину; дилатометрія; методи Обреїмова (імерсійний, інтерференційний та фотографічний) визначення показників заломлення та двоприменезаломлення; поляризаційно-оптичний та метод півхвильових напружень визначення п'єзооптичних констант; комп'ютерні методи розрахунку фізичних параметрів (зонної структури, параметрів формули Зельмейєра, оптичних констант). Низку результатів отримано за рахунок автоматизації експерименту та комп'ютерного керування вимірювань.

**Наукова новизна одержаних результатів** визначається тим, що у роботі:

- вперше з'ясовано впливи одновісних механічних навантажень на спектральні (300...800 нм) і температурні зміни (77...295 К) показників заломлення і двоприменезаломлення кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ , виявлено значну баричну деформацію оптичної індикатриси;
- встановлено баричні зміни кристалооптичних параметрів, електронної поляризованості та рефракцій;
- визначено ступінь анізотропії показника заломлення і показано, що його суттєве збільшення в районі ФП свідчить про значне зростання кількості солітонів та їх закріплення дефектами кристалічної ґратки кристала;
- вперше розраховано зонну структуру кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  з використанням двох апроксимацій обмінно-кореляційного потенціалу (узагальненої градієнтної апроксимації (GGA) та локальної густини (LDA)) у базисі плоских хвиль і встановлено, що зони валентного комплексу володіють слабкою дисперсією у  $k$ -просторі, тоді як зони провідності – значною дисперсією;

- вперше встановлено вплив одновісного механічного тиску на точки фазових переходів кристалів  $Rb_2ZnCl_4$ ; побудовано  $\sigma$ - $T$ -діаграму, що дає можливість баричного регулювання температурного інтервалу існування несумірної фази.

#### **Практичне значення одержаних результатів:**

- удосконалено методику дослідження впливу одновісних механічних навантажень на двоприменезаломлюючі властивості кристалів в широкому спектральному та температурному діапазонах;
- встановлено можливість індукованого існування ІЗД кристалів у разі прикладання одновісних тисків уздовж різних кристалофізичних напрямів;
- виявлена барична зміна двоприменезаломлення досліджуваних кристалів може бути використана для створення оптичних елементів сенсорів температури та тиску.

**Особистий внесок здобувача.** Основні експериментальні та розрахункові результати, які наведені в дисертаційній роботі, отримано автором як самостійно, так і у співпраці з іншими співавторами. Напрямок і об'єкт досліджень, поставлену мету і основні завдання дисертаційної роботи автором обрано спільно з науковим керівником доц. Курляком В.Ю. Активну участь в обговоренні всіх отриманих автором результатів приймав проф. Стадник В.Й. Автором безпосередньо синтезовано кристали, а також підготовлено зразки до вимірювань. У працях [5, 9, 13, 14] автором виміряно температурні та спектральні залежності показників заломлення, проаналізовано їх поведінку в околі фазових переходів та досліджено анізотропію. У працях [4, 10] досліджено вплив одновісного навантаження на двоприменезаломлюючі властивості, а у праці [2] розглянуто вплив одновісного механічного тиску на положення точок фазових переходів та побудовано температурно-баричну діаграму. Зонно-енергетична структура розглянута автором у працях [3, 6, 7 і 11], а пізооптичні властивості – у [1, 12]. У працях [8, 14] проаналізовано баричну поведінку показників заломлення.

**Апробація результатів дисертації.** Результати досліджень, подані в роботі, доповідались й обговорювались на: Міжнародній науковій конференції молодих учених і аспірантів (Ужгород, Україна, 18-22 травня 2015 р.); XII міжнародній науковій конференції «Electronics and Applied Physics» (Київ, Україна, 19-22 жовтня 2016); XVI міжнародній науковій конференції молодих вчених з прикладної фізики (Київ, Україна, 15-18 червня 2016); VIII

міжнародному семінарі RNAOPM 2016 (Луцьк, Україна, 1-4 червня 2016); міжнародних наукових конференціях студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики «Еврика – 2017» і «Еврика – 2018» (Львів, Україна, травень 2017 і 2018 р.); щорічних звітних наукових конференціях Львівського національного університету імені Івана Франка (2014-2018 рр.).

**Публікації.** За матеріалами дисертаційної роботи опубліковано 14 праць. З них 6 статей, включених у наукометричні бази даних Scopus та Web of Science, 2 статті у фахових виданнях України та 6 тез доповідей на конференціях та семінарах.

**Структура та об'єм дисертації.** Дисертаційна робота складається із вступу, п'яти розділів, висновків і списку цитованої літератури. Вона містить 152 сторінки, 52 рисунка, 7 таблиць, 124 бібліографічних посилань.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано доцільність виконання досліджень та актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовано мету і завдання роботи, наведено інформацію про об'єкт, предмет та методи досліджень, наукову новизну та практичну значимість одержаних результатів. Висвітлено особистий внесок здобувача, відомості про апробацію результатів роботи та публікації на тему дисертації.

У **першому** розділі розглянуто загальні властивості несумірних фаз (НФ). Відмічено, що характерною особливістю НФ кристалу ТХЦР є наявність солітонної структури. Показано, що несумірна фаза в кристалах виникає в певному інтервалі температур між упорядкованою і неупорядкованою вихідною фазами в результаті конденсації м'якої моди поблизу краю зони Бріллюена і має період, який не є кратним до періоду кристалічної ґратки. Показано, що солітонна структура спричиняє виникнення гістерезних явищ, які проявляються у неспівпадінні температур фазових переходів несумірна-сумірна фази під час охолодження та нагрівання, а також залежності величин стрибкоподібних температурних змін показників заломлення та двопроменезаломлення від часу відпалу кристалу.

Проведено літературний огляд щодо оптико-спектральних параметрів механічно вільних кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  і відмічено, що досліджень рефрактивних параметрів та розрахунків зонно-енергетичних параметрів під впливом одновісних тисків раніше не проводили.

**Другий** розділ присвячений опису методики вирощування кристалів з водного стехіометричного розчину. Описано методику орієнтації зразків та їх підготовку до проведення вимірювання. Розглянуто експериментальні

методики дослідження рефрактивних властивостей кристалів (дисперсія показників заломлення, двопронезаломлення і впливу на них одновісних тисків).

У цьому ж розділі також описано інтерференційну методику одночасного дослідження температурних змін показника заломлення та товщини кристала у прохідному світлі

У **третьому розділі** наведено результати досліджень баричних зміни двопронезаломлення  $\Delta n_i$  кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . Установлено, що  $\Delta n_i$  кристалів ТХЦР чутливе до дії одновісних тисків уздовж головних кристалофізичних напрямів і менш чутливе до дії тисків уздовж бісектрис між ними. Виявлено, що у кристалах ТХЦР одновісні напруження не впливають на температурний хід двопронезаломлення, а лише змінюють величину  $d\Delta n_i/dT$ . У НФ одновісні напруження, насамперед, збільшують температурну чутливість  $\Delta n_i$ . Під час ФП НФ-СФ виявлені стрибкоподібні зміни  $\Delta n_i$ , які для механічно затиснутого кристала дещо менші, ніж для механічно вільного (рис. 1).

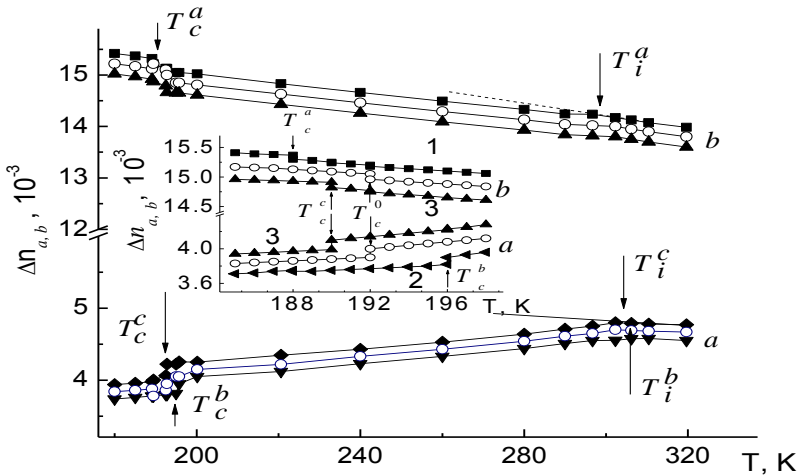


Рис. 1. Температурна залежність двопронезаломлення кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  для  $\lambda = 500$  нм і різних напрямів одновісного стискування. Світлі точки – механічно вільний кристал, темні точки – механічно затиснутий кристал; 1 –  $\sigma_a = 200$  бар; 2 –  $\sigma_b = 200$  бар; 3 –  $\sigma_c = 200$  бар. Нижні індекси біля температури – характер фазового переходу; верхні – кристалофізичний напрям одновісного стискування. На вставці – температурна залежність  $\Delta n_i$  в околі фазового переходу несумірна-сумірна фази



Установлено, що баричні зміни  $\Delta n_i$  за кімнатної температури практично лінійні: Шляхом екстраполяції прямих  $\Delta n_i = f(\sigma_m)$  або розв'язування рівняння

$$\Delta n_c(\sigma_a = 0) - l\sigma_a = \Delta n_b(\sigma_a = 0) + k\sigma_a \quad (1)$$

(де  $l$  і  $k$  – коефіцієнти баричної зміни двопронезаломлення вздовж  $b$ - і  $c$ -напрямів, відповідно). Окрім того, установлено, що за тисків  $\sigma_a \sim 587$  кбар у кристали  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  матиме місце рівність  $\Delta n_b \sim \Delta n_c \sim 10,31 \cdot 10^{-3}$ , що відповідатиме ізотропному стану даного кристалу.

Установлено, що положення точок ФП досліджуваних кристалів достатньо чутливе до дії одновісних тисків і при цьому виявлено їхнє значне зміщення по температурній шкалі в різні боки залежно від напрямку стискання: а) одновісне напруження  $\sigma_a$  зміщує фазові переходи кристала ТХЦР у бік нижчих температур з наступними коефіцієнтами:  $dT_f/d\sigma_a = -0,023$  К·бар<sup>-1</sup> і  $dT_c/d\sigma_a = -0,018$  К·бар<sup>-1</sup>; б) одновісне напруження  $\sigma_b$  зміщує точки фазових переходів кристала ТХЦР у бік вищих температур з коефіцієнтами:  $dT_f/d\sigma_b = +0,021$  К·бар<sup>-1</sup> і  $dT_c/d\sigma_b = +0,024$  К·бар<sup>-1</sup>; в) напруження  $\sigma_c$  зміщує точки ФП у бік нижчих температур з коефіцієнтами:  $dT_f/d\sigma_c = -0,015$  Кбар<sup>-1</sup> і  $dT_c/d\sigma_c = -0,009$  Кбар<sup>-1</sup>. Сумарні коефіцієнти зміщень точок ФП під впливом всіх одновісних напружень вздовж головних кристалофізичних напрямів становлять:  $dT_f/d\sigma_m = dT_f/d\sigma_a + dT_f/d\sigma_b + dT_f/d\sigma_c = -0,014$  К·бар<sup>-1</sup>,  
 $dT_c/d\sigma_m = dT_c/d\sigma_a + dT_c/d\sigma_b + dT_c/d\sigma_c = -0,003$  К·бар<sup>-1</sup>.

Виявлено, що під впливом напруження  $\sigma_c$  несумірна фаза кристала ТХЦР буде звужуватися і за тиску  $\sigma_c \sim 18,3 \pm 0,5$  кбар та температурі  $T \sim 28,3 \pm 0,1$  К у кристали ТХЦР зникне НФ – матиме місце ФП пара–сегнетофаза, тобто виникне «потрійна точка» (рис. 2).

У цьому ж розділі за температурними і спектральними змінами  $\Delta n_i$  під впливом тиску отримано дисперсійні і спектральні залежності п'єзооптичних констант  $\pi_{im}^0$ . Особливістю поведінки  $\pi_{im}^0$  кристалів ТХЦР є їхня незначна дисперсійна залежність, а характер дисперсії  $d\pi_{im}^0/d\lambda < 0$  відповідає дисперсії показників заломлення  $dn/d\lambda < 0$ . Під час ФП ПФ-НФ виявлено незначні зміни нахилу кривих  $\pi_{im}^0(T)$ ; параметр  $\frac{d\pi_{im}^0}{dT}$  у більшості випадків змінює свій знак, за винятком констант  $\pi_{23}^0$  і  $\pi_{23}^0$ .

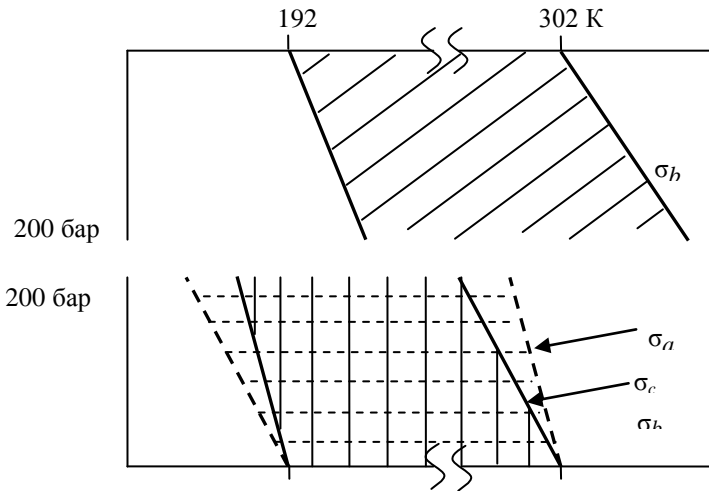


Рис. 2. Схематична фазова температурно-барична діаграма кристала  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  (похилими лініями показано можливе розширення або звуження несумірної фази під впливом одновісних напружень вздовж головних кристалофізичних осей)

У четвертому розділі розглянуто рефрактивні параметри одновісно навантажених кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . Установлено, що дисперсія  $n_i(\lambda)$  механічно вільних і одновісно затиснутих кристалів нормальна ( $dn_i/d\lambda < 0$ ) і з наближенням до краю поглинання різко зростає. Одновісні тиски не змінюють характеру кривих  $n_i(\lambda)$ , а лише величину дисперсії  $dn_i/d\lambda$ . Одновісне стискання спричиняє до зростання показників заломлення в середньому на  $\partial n_i/\partial\sigma \approx 2 \cdot 10^{-6} \text{ бар}^{-1}$ . З отриманих залежностей  $n_i(\lambda, \sigma)$  та формул Зельмейєра і Лорентц-Лоренца:

$$n_i^2 = 1 + \frac{B_{1i}\lambda^2\lambda_{0i}^2}{\lambda^2 - \lambda_{0i}^2} + \frac{B_{2i}\lambda^2\Lambda_{0i}^2}{\lambda - \Lambda_{0i}}, \quad \alpha = \frac{3}{4\pi N} \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2}, \quad R = 4\pi/3N_A\alpha = \frac{\mu}{\rho} \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \quad (2)$$

розраховано баричні зміни кристалооптичних параметрів: електронної поляризованості  $\alpha_i$ , рефракції  $R$ , довжин хвиль максимуму смуг поглинання УФ ( $\lambda_{01}$ ) та ІЧ ( $\lambda_{02}$ ) осциляторів. Встановлено, що тиски величиною до 200 бар збільшують  $\alpha_i$  в середньому на  $\sim 3-5 \times 10^{-26} \text{ см}^3$ , а рефракції на  $\sim 2-6 \times 10^{-3}$ . За баричними змінами показників заломлення  $n_i$  та співвідношенням Мосса оцінено баричні зміни ширини забороненої зони  $\partial E_g/\partial\sigma \sim 3,1 \times 10^{-5} \text{ eV/бар}$ . Баричне зміщення ефективного УФ осцилятора практично таке саме ( $\partial\lambda_0/\partial\sigma \approx (2-5) \times 10^{-3} \text{ \AA/бар} \approx 3 \times 10^{-5} \text{ eV/бар}$ ).

У цьому ж розділі проведено феноменологічний аналіз рефрактивних параметрів кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . Для цього спонтанні прирости показників

заломлення  $\delta n_i$  записано через компоненти тензора діелектричної непроникувості  $B_{ij} = \partial E_i / \partial D_j$ :

$$\delta n_i^s(T) = \frac{n_i^3(T)}{2} [\xi_i \Delta T + R_{ij}(T) P_s^2(T) + \sum_{j=1}^3 P_{ij}(T) \chi_j(T) + \omega_i \rho^2]. \quad (3)$$

Тут 1-й член описує термооптичний; 2-й – квадратичний електрооптичний; 3-й – пружнооптичний; останній член – внески параметра порядку у зміни показника заломлення. Він включає в себе зміни  $n_i$ , обумовлені коливаннями нормальних мод, змінами параметра порядку і густини солітонів. Встановлено, що внески від спонтанної деформації у зміни  $n_i(T)$  зменшуються від 70 % за температури  $T_i = 300$  К до 45 % за температури  $T_c = 192$  К. Відповідно внески від параметра порядку зростають від 30 % до 50 %. Під час ФП НФ–СФ внески від спонтанної деформації становлять 20 % за температури  $T_c$  і 50 % за температури  $T_i$ . Внески від параметра порядку під час ФП стрибкоподібно зростають на  $8,0 \cdot 10^{-4}$  і з пониженням температури спочатку зростають, а за температури  $\sim 130$  К починають зменшуватись. При тому величина внесків від параметра порядку у температурні зміни показників заломлення становить від 75 % до 40 % за температури 77 К. Аномальну поведінку внесків від параметра порядку та спонтанної деформації, на нашу думку, можна пояснити урахуванням у розкладі термодинамічного потенціалу внесків з  $\rho^4$  і  $\rho^6$ .

В околі  $T_i$  внески  $\delta n_i^{\omega, l}$  можна представити у вигляді  $\delta n_i^{\omega, l} \approx (T_i - T)^\beta$ , де визначений нами критичний індекс  $\beta = 0,31 \pm 0,02$ . Зміни параметра  $\beta$  в умовах прикладання одновісних напружень  $\sigma_m$  порівняно незначні і попадають в діапазон похибок вимірювань і розрахунків. Величина  $\beta$  приблизно відповідає значенню  $\beta = 1/4$ , яке впливає з теорії Ландау для ФП.

У **п'ятому розділі** розглянуто оптико-електронні властивості кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . Проведено розрахунки зонної структури кристалів з використанням двох апроксимацій обмінно-кореляційних потенціалів (GGA і LDA) у базисі плоских хвиль. Встановлено, що зони валентного комплексу мають слабку дисперсію у  $k$ -просторі, тоді як зони провідності – значну дисперсію. Область найвищої дисперсії зон локалізована поблизу центру зони Бріллюена – точка  $\Gamma$ . Найменша пряма заборонена щілина (точка  $\Gamma$ ) складає 4,61 еВ у випадку GGA та 4,34 еВ у випадку LDA (рис. 3).

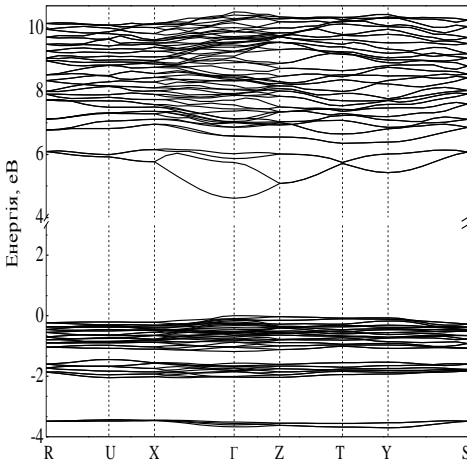


Рис. 3. Фрагмент зонно-енергетичної діаграми кристалу  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  (GGA-потенціал)

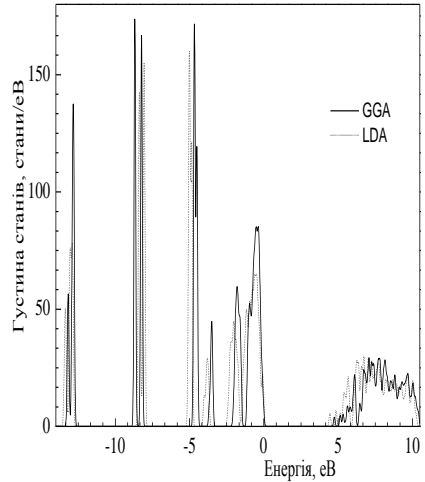


Рис. 4. Розподіл повної густини станів для кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$

Аналіз парціальних внесків окремих орбіталей у функцію повної густини станів та парціальних внесків окремих зон в електронну густину (рис. 4) дав змогу визначити генезис валентних зон і нижніх зон провідності кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . Валентний комплекс монокристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  складається з окремих вузьких груп зон, розділених енергетичними проміжками. Область густини станів поблизу мітки  $-13$  eV (рис. 4) за шкалою енергії зв'язку формується зв'язаними  $3s$  станами Cl. Зони  $3p$  станів Cl розділені на три підзони,  $0 \dots -1,0$  eV,  $-1,2 \dots -2,2$  eV,  $-3,2 \dots -3,8$  eV. До другої області суттєво підмішані  $4p$  стани Zn, а у третій області –  $4s$ -Zn стани. В області  $-8 \dots -9$  eV розташовані зони сформовані  $4p$ -орбіталами рубідію. Основний вклад у густину станів в області  $-4,6$  eV припадає на  $d$ -орбіталі Zn. Важливо відзначити внесок  $d$ -орбіталей Zn у зони, що разом із  $p$ -станами хлору та гібридизованими  $sp$ -станами Rb формують вершину валентного комплексу.

У зоні провідності спостерігаємо 4 зони в області  $4,61 \dots 6,25$  eV, які відділені від решти зон провідності невеликим енергетичним проміжком. Найнижча зона провідності пов'язується зі  $s$ -станами рубідію для

квазіімпульсів електронів провідності з високосиметричної лінії зони Бріллюена  $\Gamma-Z$ . Три наступні зони провідності, передусім, формуються  $s$ -орбіталями Rb та  $s$ -станами Zn, які гібридизовані з  $p$ -станами хлору. Власне з цими станами цинку (т. Z) можна пов'язувати характерний пік непрямозонного переходу, який спостерігають у довгохвильовій ділянці спектру фундаментального поглинання. Можна стверджувати, також, що піки поблизу краю фундаментального поглинання формуються за рахунок переходів між  $p$ -станами Cl вершини валентної зони та  $s$ -станами Rb трьох нижніх зон провідності.

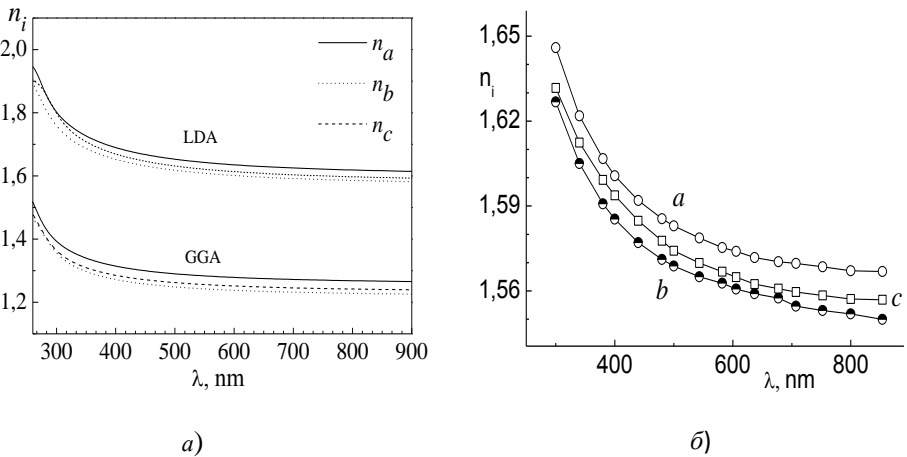


Рис. 5. Теоретичні (а) та експериментальні (б) дисперсійні залежності показників заломлення  $n(\lambda)$  кристала  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$

На основі залежностей дійсної та уявної частини комплексної діелектричної проникності за допомогою дисперсійних співвідношень Крамерса–Кроніга також розраховано спектральні залежності показників заломлення  $n_i(\lambda)$  та поглинання  $k(E)$  (рис. 5). Тут також наведено експериментальні значення  $n_i(\lambda)$ , отримані інтерференційним методом Обреїмова. Бачимо, що дисперсія показників заломлення в обох випадках є нормальною ( $\partial n/\partial \lambda < 0$ ) і становить  $\partial n/\partial \lambda \sim 1 \dots 2 \cdot 10^{-4} \text{ nm}^{-1}$ . Характер анізотропії для теоретично розрахованих обома методами і експериментальними даними  $n_i$  зберігається однаковим:  $n_a > n_c > n_b$ . Якщо порівняти теоретично отримані LDA методом значення показників заломлення ( $n_a = 1,64804$ ;  $n_c = 1,63026$ ;  $n_b = 1,61249$ ) з експериментально отриманими ( $n_a = 1,58317$ ;  $n_c = 1,57400$  і

$n_b = 1,56846$ ), то бачимо, що розбіжність між експериментально отриманими і розрахованими становить  $\delta n \sim 0,05 \dots 0,07$ .

З рисунка бачимо, що при довжинах хвиль  $\sim 200$  нм на теоретичних дисперсійних залежностях спостерігається аномальна поведінка показників заломлення ( $\partial n / \partial \lambda > 0$ ).

Використовуючи отримані теоретичні значення показників заломлення, також розраховано дисперсійні залежності  $\Delta n_i$  і проведено їх порівняння з експериментально отриманими інтерференційним методом Обреїмова. Встановлено, що в обох випадках у ділянці спектру  $\lambda > 400$  нм дисперсія  $\Delta n_i$  є нормальною ( $\partial \Delta n / \partial \lambda < 0$ ). Нижче 400 нм для  $a$ - і  $b$ -напрямів  $\Delta n_i$  починає зменшуватись і спостерігається аномальна поведінка ( $\partial \Delta n / \partial \lambda > 0$ ), що свідчить про існування ізотропної точки в УФ-ділянці спектру.

## ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

Робота присвячена з'ясуванню впливу одновісного навантаження на двопронезаломлення  $\Delta n_i$ , показники заломлення  $n_i$ , оптико-електронні параметри та положення точок фазових переходів, що охоплюють несумірну фазу, діелектричного кристала  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  в ділянці температур (77–400 К). Використано інтерференційну методику досліджень в поляризованому світлі та метод Обреїмова. Отож:

1. Досліджено температурні, спектральні і баричні залежності  $\Delta n_i$  кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . Встановлено, що  $\Delta n_i$  є чутливим до дії одновісних тисків. Показано, що напруження  $\sigma_m$  ведуть до різних за знаком змін  $\Delta n_i$ . Виявлено, що за тисків  $\sigma_a \sim 587$  кбар у кристалі  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  матиме місце рівність  $\Delta n_b \sim \Delta n_c \sim 10,31 \cdot 10^{-3}$ , що відповідатиме ізотропному стану даного кристала, за якого  $n_c = n_b$ .

2. Установлено, що положення точок ФП досліджуваних кристалів чутливе до дії одновісних напружень і при цьому виявлено значне зміщення точок ФП по температурній шкалі у різні напрями залежно від напрямку стиснення, що зумовлено впливом одновісних напружень на структуру кристала ТХЦР, а саме на обертання тетраєдрів  $\text{ZnCl}_4$ . Побудовано фазову температурно-баричну діаграму кристала  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ , з якої виявлено, що за тисків  $\sigma_c \sim 18,3 \pm 0,5$  кбар і температурі  $T \sim 28,3 \pm 0,1$  К в кристалі зникне несумірна фаза і матиме місце ФП параелектрична–сегнетоелектрична фази.

3. Визначено спектральні й температурні залежності п'єзооптичних констант  $\pi_{im}^0$  кристалу  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . Виявлено, що вони володіють незначною дисперсійною залежністю, а характер дисперсії  $d\pi_{im}^0/d\lambda < 0$  відповідає

дисперсії показників заломлення  $dn_i/d\lambda < 0$ . Виявлено значні аномалії  $\pi_{im}^0$  у точці ФП  $T_c = 192$  К і показано, що вони зумовлені зміною індукованого  $\Delta n_i$  за рахунок виникнення спонтанної поляризації, а також значним впливом одновісного механічного напруження на солітонну структуру кристала за даної температури.

4. З'ясовано спектральні, температурні та баричні залежності показників заломлення  $n_i(\lambda)$  і показано, що одновісне стискання не змінює характеру кривих  $n_i(\lambda)$  і  $n_i(T)$ , а тільки величини  $dn_i/d\lambda$  та  $dn_i/dT$ . Розраховані баричні залежності електронної поляризованості  $\alpha_i$ , рефракції  $R$  та параметрів УФ осциляторів ( $\lambda_{0i}$ ,  $B_{1i}$ ). Установлено, що одновісне стискання збільшує рефракції  $R$ , поляризованість  $\alpha_i$ . Показано, що зростання  $n_i$  під впливом одновісного тиску головню обумовлено збільшенням рефракцій (~65 %) за рахунок зміни ширини забороненої зони  $E_g$  та довгохвильового зміщення максимуму смуги УФ поглинання та густини ефективних осциляторів (~35 %) кристала ГХЦР.

5. Проведено розділення внесків у температурні зміни  $n_i$  від електрооптичного, пружнооптичного ефектів та від параметра порядку. Виявлену аномальну поведінку внесків від параметра порядку і спонтанної деформації, що можна пояснити урахуванням у розкладі термодинамічного потенціалу внесків від параметра порядку 4-ї та 6-ї степенів. Оцінено критичний індекс  $\beta = 0,31 \pm 0,02$ , зміни якого є незначними в умовах прикладання одновісних напружень  $\sigma_m$ .

6. Проаналізовано ступінь анізотропії показника заломлення  $A_{n-1}$  і показано, що суттєве збільшення коефіцієнта анізотропії  $A_{n-1}(T)$  в районі  $T_c$  свідчить про значне зростання кількості солітонів та їх закріплення на дефектах кристалічної ґратки кристала.

7. Розраховано зонну структуру кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  з використанням двох апроксимацій обмінно-кореляційного потенціалу (узагальненої градієнтної апроксимації (GGA) та локальної густини (LDA)) у базисі плоских хвиль. Встановлено, що зони валентного комплексу володіють слабкою дисперсією у  $k$ -просторі, тоді як зони провідності – значною дисперсією. Область найвищої дисперсії зон локалізована поблизу центру зони Бріллюена – точка Г. Найменша пряма заборонена щілина (точка Г) складає 4,61 еВ у випадку GGA та 4,34 еВ у випадку LDA.

8. Розраховано атомну заселеність складових компонент, довжину і ступінь заселеності найкоротших атомних зв'язків в кристалі  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ .

Показано, що максимальна заселеність зв'язку Zn–Cl в тетраедрі  $\text{ZnCl}_4$  становить 0,56, що підтверджує високу ковалентність зв'язків Zn–Cl.

9. На основі залежностей дійсної та уявної частини комплексної діелектричної проникності за допомогою дисперсійних співвідношень Крамерса–Кроніга розраховано спектральні залежності показників заломлення  $n_i(\lambda)$  і двопронезаломлення  $\Delta n_i$  та проведено їх порівняння з експериментальними даними. Встановлено, що дисперсія ( $\partial n/\partial \lambda < 0$ ) та характер анізотропії ( $n_a > n_c > n_b$ ) зберігається однаковим в обох випадках. За довжин хвиль  $\sim 200$  нм на теоретичних дисперсійних залежностях  $n_i$  спостерігається аномальна поведінка показників заломлення ( $\partial n/\partial \lambda > 0$ ). Нижче 400 нм виявлено аномальну поведінку  $\Delta n_i$  ( $\partial \Delta n_i/\partial \lambda > 0$ ), що свідчить про існування ізотропної точки в даному кристалі в УФ-ділянці спектру.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ ДИСЕРТАЦІЇ ВИКЛАДЕНО В ТАКИХ ПУБЛІКАЦІЯХ

1. Kurlyak V. Yu., Stadnyk V. Yo., Bovgyra O. V., Stakhura V. B. Piezooptic properties of incommensurately modulated  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  crystals // Optics and Spectroscopy. – 2015. – V. 118, № 4. – С. 547–551
2. Kurlyak V. Yu., Stadnyk V. Yo., Stachura V. B. Temperature-pressure phase diagram of  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  crystals // Journal in Applied Spectroscopy. – 2015. – V. 82, № 2. – P. 228–233.
3. Andriyevsky B., Kurlyak V. Yu., Stadnyk V. Y., Romanyuk M. O., Stakhura V., Piasecki M. Electronic band structure and related properties of  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  crystals at different hydrostatic pressures // Computational Materials Science – 2015. – V. 111. – P. 257-262.
4. Kurlyak V. Yu., Stadnyk V. Y., Stakhura V., Kohut Z. O. Birefringence of mechanically stressed  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  crystals // Crystallography Reports. – 2015. – V. 60, № 6. – P. 929-934.
5. Курляк В.Ю., Стадник В.Й., Смахура В.Б. Показники заломлення одновісно затиснутих кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  в околі фазових переходів // Журнал фіз. дослід. – 2015. – Т.19, № 1/2. – С.1703-1 – 1703-6.
6. Курляк В., Бовгира О., Стадник В., Матвіїшин І., Смахура В., Карплюк Л. Зонна структура кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  у параелектричній фазі // Електроніка та інформаційні технології. – 2015. – № 5. – С.22-32.
7. Andriyevsky B., Kurlyak V. Yu., Stadnyk V. Y., Romanyuk M. O., Stakhura V. B. Electronic-and-optical properties of  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  crystals // Zeszyty Naukowe Wydziału Elektroniki i Informatyki. – 2015. – № 8. – P. 5-14.



8. Stadnyk V. Y., Stakhura V. B., Andrievskii B. V. Refractometry of  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  crystals under uniaxial pressure // Optics and spectroscopy. – 2017. – V. 122, № 6. – С. 995–1001.

9. Стахура В.Б., Курляк В.Ю., Стадник В.Й. Рефрактометрія одновісно затиснутих кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . // Тези доповідей міжн. конф. мол. учених і аспірантів, 18-22. 05. 2015 р., Ужгород. – С. 218-219.

10. Stakhura V. B., Kurlyak V. Yu., Stadnyk V. Y., Karplyuk L. T., Matviishyn I. M. Influence of pressure on optical parameters of  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  crystals // Proceedings VIII Inter. workshop RNAOPM 2016. Lutsk-Lake “Svityaz”. Ukraine. 1-4. 06.2016. – P.23-25.

11. Stakhura V. B., Andriyevsky B. V., Stadnyk V. Yo., Kurlyak V. Yu. and Lepska M. M. // Optical - electronic parameters of  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  crystals Proceedings XII Inter. Scien. Conf. "Electronics and Applied Physics" – Kyiv, Ukraine, 19-22.10.2016. – P. 30-32.

12. Stakhura V. B., Kurlyak V. Yu., Stadnyk V. Yo. and Karplyuk L. T. Piezo-optical parameters of  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  crystals // Proc. XVI International Young Scientists Conference on Applied Physics – Kyiv, Ukraine, 15-18.06.2016. – P. 111-113.

13. Стахура В. Б., Курляк В. Ю., Стадник В. Й., Карплюк Л. Т. Анізотропія показників заломлення кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  // Міжн. конф. ЄВРИКА-2017. Тези доповідей. – В 16.

14. Матвійів Р., Стахура В., Стадник В. Баричні зміни рефрактивних параметрів кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  // Міжн. конф. ЄВРИКА-2018. Тези доповідей. – В 11.

## ABSTRACT

**Stakhura V.B. The optoelectronic properties of uniaxially clamped incommensurate modulated  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  crystals.** – Qualification scientific work with the manuscript copyright.

The thesis for a candidate of physical-mathematical science degree in specialty 01.04.10 “Physics of semiconductors and dielectrics”. – Ivan Franko National university of Lviv, Ministry of Science and Education of Ukraine, Lviv, 2018.

In the work the temperature, spectral and pressure dependences of birefringence  $\Delta n_i$  of  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  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 piezo-optical coefficients are investigated. It has been found that they have small dispersion dependence and significant anomalies at phase transition temperature  $T_c = 192$  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  $\sigma_c \sim 18,3 \pm 0,5$  kbar and the temperature  $T \sim 28,3 \pm 0,1$  K.

The spectral, temperature and pressure dependences of the refractive indices  $n_i(\lambda)$  have been studied and it has been shown that the uniaxial compression does not change the properties of curves  $n_i(\lambda)$  and  $n_i(T)$ , but change the quantities  $dn_i/d\lambda$  and  $dn_i/dT$ . Pressure dependences of electron polarization  $\alpha_i$ , refraction  $R$  and parameters of ultraviolet oscillators ( $\lambda_{0i}$ ,  $B_{1i}$ ) have been calculated. It has been found that the uniaxial compression increases  $R_i$  and  $\alpha_i$ . It was shown that increasing of  $n_i$  because of the uniaxial pressure was mainly due to increasing of refractions ( $\sim 65\%$ ) 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 ( $\sim 35\%$ ) of the  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  crystal.

The band structure of  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  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  $\Gamma$  point. The value of the smallest direct band gap (at  $\Gamma$  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  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$  crystal have been calculated. It has been shown that the maximum population of Zn-Cl bond in  $\text{ZnCl}_4$  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  $n_i(\lambda)$  and birefringence  $\Delta n_i$  have been calculated and compared with experimental data. It has been established that the dispersion ( $\partial n/\partial \lambda < 0$ ) and the character of anisotropy ( $n_a > n_c > n_b$ ) remain the same in both cases.

## АНОТАЦІЯ

**Стахура В.Б. Оптико-електронні властивості одновісно затиснутих несумірно модульованих кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ .** – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10 «Фізика напівпровідників і діелектриків». – Львівський національний університет імені Івана Франка, МОН України, Львів, 2018.

У роботі досліджено температурні, спектральні й баричні залежності двопроменезаломлення  $\Delta n_i$  та показників заломлення  $n_i(\lambda)$  кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . Встановлено значну баричну чутливість  $\Delta n_i$  і  $n_i$ . Показано, що одновісне стискання не змінює характеру кривих  $n_i(\lambda)$  і  $n_i(T)$ , а тільки величини  $dn_i/d\lambda$  та  $dn_i/dT$ . Розраховані баричні залежності електронної поляризованості  $\alpha_i$ , рефракції  $R$  та параметрів УФ осциляторів ( $\lambda_{0i}$ ,  $B_{1i}$ ) та виявлено їх баричну зміну. Установлено, що одновісні напруження зміщують положення точок ФП по температурній шкалі у різні напрями залежно від напрямку стискання. Побудовано фазову температурно-баричну діаграму кристала  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . Використовуючи баричні залежності  $\Delta n_i$ , досліджено спектральні й температурні залежності п'єзооптичних констант  $\pi_m^0$ .

Розраховано зонну структуру кристалів  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . 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  $\Gamma$ ). Визначено значення найменшої прямої забороненої щілини. Розраховано атомну заселеність складових компонент, довжину і ступінь заселеності найкоротших атомних зв'язків в кристалі  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ .

На основі залежностей дійсної та уявної частини комплексної діелектричної проникності за допомогою дисперсійних співвідношень Крамерса–Кроніга розраховано спектральні залежності  $n_i(\lambda)$  і  $\Delta n_i$  та проведено їх порівняння з експериментальними даними. Встановлено, що дисперсія ( $\partial n/\partial \lambda < 0$ ) та характер анізотропії ( $n_a > n_c > n_b$ ) зберігається однаковими в обох випадках.

## АННОТАЦИЯ

**Стахура В.Б. Оптико-электронные свойства одноосно сжатых несоизмерно модулированных кристаллов  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ .** - Квалификационная научная работа на правах рукописи.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 «Физика полупроводников и диэлектриков». - Львовский национальный университет имени Ивана Франко, МОН Украины, Львов, 2018.

В работе исследованы температурные, спектральные и барические зависимости двулучепреломления  $\Delta n_i$  и показателей преломления  $n_i(\lambda)$  кристаллов  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . Установлена значительная барическая чувствительность  $\Delta n_i$  и  $n_i$ . Показано, что одноосное сжатие не изменяет характер кривых  $n_i(\lambda)$  и  $n_i(T)$ , а только величины  $dn_i/d\lambda$  и  $dn_i/dT$ . Рассчитаны барические зависимости электронной поляризуемости  $\alpha_i$ , рефракции  $R$  и параметров УФ осцилляторов ( $\lambda_{0i}$ ,  $B_{1i}$ ) и обнаружено ихнее барическое изменение. Установлено, что одноосные напряжения смещают положения точек ФП по температурной шкале в разные направления в зависимости от направления сжатия. Построена фазовая температурно-барическая диаграмма кристалла  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . Используя барические зависимости  $\Delta n_i$ , исследованы спектральные и температурные зависимости пьезооптических констант  $\pi_{im}^0$ .

Рассчитана зонная структура кристаллов  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ . Установлено, что валентная зона владеет слабой дисперсией в  $k$ -пространстве, тогда как зона проводимости – значительной дисперсией, а область наибольшей дисперсии зон локализована поблизости центра зоны Бриллюэна (точка  $\Gamma$ ). Определены значения наименьшей прямой запрещенной щели. Рассчитаны атомная заселенность составляющих компонент, длину и степень заселенности самых коротких атомных связей в кристалле  $\text{Rb}_2\text{ZnCl}_4$ .

Основываясь на зависимостях действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости с помощью дисперсионных соотношений Крамерса–Кронига рассчитаны спектральные зависимости  $n_i(\lambda)$  и  $\Delta n_i$ , а также проведено ихнее сравнение с экспериментальными данными. Установлено, что дисперсия ( $\partial n/\partial \lambda < 0$ ) и характер анизотропии ( $n_a > n_c > n_b$ ) остаются одинаковыми в обоих случаях.