

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

БОКОТЕЙ Олесі Володимирівни

ПЕРШОПРИНЦИПІНІ РОЗРАХУНКИ ЕЛЕКТРОННИХ І ФОНОННИХ ПІДСИСТЕМ І ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ГІРОТРОПНИХ КРИСТАЛІВ ТИПУ $Hg_3X_2Y_2$

представлену на здобуття

наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

за спеціальністю 01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків

Одна з визначальних рис об'єктів досліджень співробітниками фізичного факультету Ужгородського університету, якому нещодавно виповнилося 50 років, є їх багатокомпонентність. Такий їх вибір не є забаганкою, а реальним засобом досягнення бажаних фізичних характеристик. Кристали типу $Hg_3X_2Y_2$ ($X = S, Se, Te, Y = F, Cl, Br$), які є темою рецензованої теоретичної дисертаційної роботи, вже були предметом ряду досліджень, зокрема, і в стінах Ужгородського університету. Проте поява ряду сучасних потужних обчислювальних методик та підходів, результати отримані з їх використанням, дозволяють глибше зрозуміти явища в таких кристалах, дати більш адекватну інтерпретацію експериментальних даних. З врахуванням їх неординарних електрофізичних та оптичних властивостей, досягнення такого поглиблення є безумовно актуальними.

Робота написана на 155 ст. і містить 5 розділів. Її мета – дати теоретичний опис електронних та фононних спектрів в кубічних кристалах $Hg_3X_2Y_2$ з неординарними фізичними властивостями та застосувати отримані результати до даних експериментальних досліджень таких кристалів.

У 1-му розділі приведений огляд фізичних властивостей кристалів родини $Hg_3X_2Y_2$.

2-ий розділ містить результати розрахунків зонного спектру кордероїтів, парціальні внески їх компонент до формування конкретних зон. Встановлено, що ізоструктурні кубічні халькогалогеніди меркурію типу $Hg_3X_2Y_2$ є непрямозонними напівпровідниками. Вказано на точки зони Бріллюона, які визначають заборонену зону. Проаналізований ефект заміни халькогенів та присутності вакансій на електронну енергетичну структуру кристалу.

3-ій розділ присвячений результатам комплексного аналізу фононного спектру кордероїтів — дисперсії фононів вздовж високосиметричних точок зони Бріллюона, теоретико-груповому аналізу фундаментальних коливань, активності тих чи інших мод у комбінаційному розсіюванні.

4-й розділ проаналізовані явище гіротропії в кордероїтах, внесок міжзонних оптичних переходів в оптичне обертання. оптична активність в кристалах $Hg_3Te_2Cl_2$ та $Hg_3Se_2Cl_2$, а у 5-у розділі приведені оцінки показників заломлення, оптичних діелектричних констант та коефіцієнтів відбивання для поліморфів α -, β -, γ - $Hg_3S_2Cl_2$ та кристалу $Hg_3Te_2Cl_2$ для спектральної області, далекої від краю поглинання, де відсутня дисперсія показника заломлення.

Таким чином, робота є комплексним теоретичним дослідженням, що поглиблює розуміння фізичних явищ у кордероїтах, а отже, сприятиме успішнішому практичному використанню таких кристалів.

Найважливішими науковими досягненнями роботи, на мою думку, є такі:

- результати зонного спектру в рамках різних моделей теоретичних розрахунків кубічних кристалів родини кордероїти $Hg_3X_2Y_2$, включно з випадками наявності в їхній елементарній комірці вакансій Cl чи Te ;
- розрахунки фононного спектру, симетрійний аналіз фононних мод і застосування отриманих результатів до інтерпретації даних експериментальних досліджень оптичної активності, оптичних характеристик.

Приведу деякі зауваження до роботи:

1. На жаль, з посилань [1-13], які мали би підтвердити актуальність досліджень кристалів, що є предметом досліджень в дисертації, відсутні роботи з поза меж України, опубліковані після 2000 р. Їх нема?
2. Не зовсім строгим є твердження на ст.60-61: „зміна характеру ув'язнення координаційних октаедрів... супроводжується перебудовою електронного спектру”. Насправді, взаємозв'язок „електронна структура/зв'язок” вимагає самоузгодженого розв'язку. Так, на початку стаціонарне рівняння Шредінгера розв'язують з затравковими хвильовими функціями електрона, на основі яких коригується одноелектронний потенціал. Далі розв'язується рівняння з відкоригованим потенціалом. При цьому отримані хвильові функції застосовують до подальшого коригування потенціалу. Тому не можна сказати хто кого формує – електронні стани зв'язок чи навпаки.
3. В тексті дисертації присутній ряд описок. Серед них на ст.17 двічі міститься твердження про швидкість звуку $\sim 10^{15}$ см/с (!). На ст.117 плутанина з питомим обертанням. Пропоновані записи „град·мм⁻³” (чому показник 3?), і нижче „ $\rho = 1.74 \cdot 10^3$ рад/м⁻¹” можна подати простіше: „град·мм⁻³” і „ $\rho = 1.74 \cdot 10^3$ рад·м” відповідно. Проте ні один з записів не співпадає з розмірністю питомого обертання.

4. В роботі зустрічаються невластиві для української мови вирази чи русизми: *представляє* (замість *є, являє, становить*), *зміщення* (замість *зсув*), *обумовлений* (замість *зумовлений*), *пополам* (замість *навпіл*), *більш високий, більш значний* (чому не *вищий, значніший?*) тощо.

Проте зроблені зауваження ніяким чином не впливають на загальне позитивне враження від роботи. Вона логічна за змістом, написана на належному науковому рівні. Достовірність отриманих результатів визначається застосуванням добре апробованих теоретичних підходів і моделей, достатньою апробацією у вигляді наукових публікацій в авторитетних журналах та виступами на конференціях. Автореферат дисертації повністю відбиває її суть і результати. Підсумовуючи можна твердити, що за об'ємом, актуальністю тематики, рівнем досліджень, отриманими результатами і висновками, які з них випливають, робота повністю задовільняє вимогам, що ставляться до кандидатських дисертацій. § "Порядку присудження наукових ступенів", а її автор, Бокотей Олеся Володимирівна, заслуговує присудження їй наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків

Офіційний опонент

Доктор фізико-математичних наук

Професор Національного університету

"Львівська політехніка"

Лукіянець Б.А.

Підпис проф. Лукіянца Б.А. зазначають

Вчений секретар



Брилинський Р.Б.