# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0825U003799

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 26-09-2025

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**

## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Яворський Петро Володимирович
2. Petro V. Yavorskyi

**Кваліфікація:**

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** доктор філософії

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 104

**Назва наукової спеціальності:** Фізика та астрономія

**Галузь / галузі знань:** природничі науки

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** Фізика та астрономія

**Дата захисту:** 17-10-2025

**Спеціальність за освітою:** Інженерія програмного забезпечення

**Місце роботи здобувача:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## III. Відомості про організацію, де відбувся захист

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** PhD 10946

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут електронної фізики Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05540008

**Місцезнаходження:** вул. Університетська, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

## IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут електронної фізики Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05540008

**Місцезнаходження:** вул. Університетська, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

## V. Відомості про дисертацію

**Мова дисертації:** Українська

**Коди тематичних рубрик:** 29.31.23, 58.35.06, 20.54.02, 20.54.06

### Тема дисертації:

1. Ab initio метод паспортизації напівпровідникових матеріалів для дозиметричних досліджень
2. Ab initio method for the certification of semiconductor materials for dosimetric research

### Реферат:

1. Яворський П.В. Ab initio метод паспортизації напівпровідникових матеріалів для дозиметричних досліджень. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» – Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, 2025. Дисертацію присвячено розробці теоретичного інструментарію та методології ab initio паспортизації напівпровідникових матеріалів для дозиметричних досліджень, що поєднує сучасні методи теорії дозиметричних, люмінесцентних явищ у напівпровідниках, чисельного моделювання та програмну реалізацію розрахункового пакету Lumini. Перший розділ присвячений аналізу теорії та практичним здобуткам сучасної дозиметрії, що використовує явища термолюмінесценції в опромінених широкозонних напівпровідниках. Розділ містить основи взаємодії іонізуючого випромінювання із напівпровідниками при якій відбувається акумуляція променевої енергії у речовині, критерії вибору дозиметричного індикатора для

фіксації поглинутої дози. Детально розглядаються схеми енергетичних рівнів, відповідальних за електрон–діркову анігіляцію та термолюмінесценцію, поширену модель OTOR (One Trap One Recombination), існуючі теоретичні методи їх дослідження. Розглядаються вимоги до напівпровідникових матеріалів у якості дозиметрів, зокрема такі як хімічний склад, ширина забороненої зони та ефективний атомний номер речовини. Детально аналізуються різного роду наближення, що використовує сучасна теорія дозиметрії, аналізуються їх умови та допустимість. Показано, що традиційний методики описання термолюмінесцентних ефектів практичної дозиметрії обмежує можливість їх застосування для паспортизації матеріалів, що потребує використання ab initio методів. Другий розділ містить основи скейлінг–методу, запропонованого вперше для ab initio розв'язків систем диференційних рівнянь, що описують термолюмінесцентні характеристики опромінених напівпровідників. В розділі розглянута практика застосування скейлінг–перетворень, які приводять параметри OTOR–моделі до безрозмірного вигляду, оптимального для застосування чисельних методів як алгоритм Рунге–Кутта. Розділ містить результати використання методики Монте Карло, запропонованої вперше для врахування стохастичну природу мікропроцесів при кінетичних переходах «зона–рівень пасток/рекомбінації», що дозволило моделювати реальні умови дозиметричних процесів. Показано, що застосування процедури скейлінгу вирішує ряд критично важливих задач: переформатування рівнянь OTOR–моделі до безрозмірного виду; спрощення процедури фітування теоретичних та експериментальних даних для паспортизації дозиметричних матеріалів; комп'ютерного моделювання для зменшення залежності від обчислювальних методик та забезпечення універсальності коду при роботі із експериментальними даними. Для ілюстрації наведено результати ab initio моделювання термолюмінесцентних явищ та обговорення допустимості наближень. У третьому розділі представлено результат імплементації скейлінг–процедури моделі OTOR у розрахунковий пакет Lumini, створений вперше для вирішення комплексу задач ab initio моделювання процесів термолюмінесценції опромінених напівпровідників, оптимізації дозиметричних індикаторів та паспортизації дозиметричних матеріалів. Обговорюється архітектура та функціональні можливості пакету Lumini, приведено приклади застосування від ab initio моделювання до роботи із експериментальними даними. Вказано, що розроблений пакет Lumini є необхідною умовою для паспортизації дозиметричних матеріалів та служить повноцінною платформою для інтеграції експерименту та теорії в сучасних дозиметричних дослідженнях, використання можливостей штучного інтелекту. Заключний четвертий розділ роботи стосується основ паспортизації дозиметричних матеріалів, які здатні забезпечити точне оцінювання дозового навантаження в широкому діапазоні умов опромінення. Це потребує створення бази даних енергетичних та кінетичних параметрів дозиметрів із достатньою достовірністю і може бути забезпечено використанням ab initio методик. Обговорюється проблема пошуку та використання ефективних оптимізаційних критеріїв, алгоритмів ШІ, які здатні встановлювати набір параметрів, що найкраще узгоджується з експериментальними даними. В розділі обговорюється умови використання ШІ для оптимізації дозиметричних досліджень як методів машинного навчання, ідентифікації форм світіння та пошук закономірностей багатопараметричних масивів даних при паспортизації дозиметричних матеріалів. Показано, що застосування нейронних мереж, моделей глибинного навчання, дерев рішень і ансамблевих методів дозволяє не лише підвищити точність та швидкість процесу паспортизації, але й автоматизувати значну частину рутинних обчислень. Розділ містить перші дані паспортизації опромінених дозиметричних матеріалів LiF, A12O3 та Li2B4O7.

2. Petro Yavorskyi Ab initio Method for the Certification of Semiconductor Materials for Dosimetric Research. – A Qualification Scientific Work in Manuscript Form. Dissertation Submitted for the Degree of Doctor of Philosophy in Speciality 104 "Physics and Astronomy" – Institute of Electron Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Uzhhorod, 2025. The dissertation is devoted to the development of a theoretical framework and methodology of the ab initio certification of semiconductor materials for dosimetric studies, integrating contemporary methods from the theory of dosimetric and luminescent phenomena in semiconductors, numerical modelling, and the software implementation of the Lumini computational package. The first chapter analyzes theoretical foundations and practical achievements of contemporary dosimetry based on thermoluminescence in

irradiated wide–band gap semiconductors. It outlines the interaction of ionizing radiation with semiconductors, mechanisms of energy storage in solids, and criteria for selecting dosimetric indicators. Particular attention is given to energy–level schemes responsible for electron–hole recombination and thermoluminescence, the OTOR (One Trap–One Recombination) model, and existing theoretical methods. Requirements for semiconductors as dosimetric materials are discussed, including chemical composition, band gap, and effective atomic number. It is shown that traditional approaches to thermoluminescent analysis are insufficient for reliable material certification, thus requiring ab initio techniques. The second chapter introduces the scaling method, proposed for the first time for ab initio solutions of differential equations describing thermoluminescent characteristics of irradiated semiconductors. Scaling transformations reduce OTOR model parameters to a dimensionless form, enabling effective use of numerical algorithms such as Runge–Kutta. The chapter also presents a novel application of the Monte Carlo method to account for the stochastic nature of microprocesses in transitions between the conduction band and trapping/recombination levels. This approach allowed realistic modeling of dosimetric processes. The scaling procedure proved essential for reformatting OTOR equations into a dimensionless representation, simplifying the fitting of theoretical and experimental data, and reducing dependence on computational techniques while ensuring universality of the simulation code. The third chapter presents the implementation of scaling procedures into the Lumini computational package, developed for comprehensive ab initio modeling of thermoluminescence in irradiated semiconductors, optimization of dosimetric indicators, and material certification. The architecture and functional capabilities of Lumini are described, with examples ranging from purely theoretical simulations to processing of experimental data. The package is shown to be a necessary platform for integrating experiment and theory in modern dosimetric studies and for employing artificial intelligence methods in data analysis. The fourth chapter addresses the principles of certification of dosimetric materials to ensure accurate dose evaluation under diverse irradiation conditions. The creation of reliable databases of energy and kinetic parameters of dosimeters is emphasized, achievable through ab initio approaches. Attention is given to optimization criteria and AI algorithms capable of identifying parameter sets in best agreement with experimental data. Applications of machine learning, luminescence curve recognition, and multiparametric data analysis are considered. The use of neural networks, deep learning models, decision trees, and ensemble methods is shown to enhance both accuracy and efficiency of certification, while automating routine calculations. The dissertation presents the first certification results for irradiated dosimetric materials LiF, $Al_2O_3$, and $Li_2B_4O_7$, demonstrating the effectiveness of the developed ab initio methodology. The research establishes a theoretical and computational framework that integrates physical modeling, numerical methods, and artificial intelligence, providing a reliable basis for the development of standardized dosimetric systems.

**Державний реєстраційний номер ДіР:** 0124U004305; 0121U100676; 0118U005514

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:** Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:** Не застосовується

**Підсумки дослідження:** Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

**Публікації:**


- 1. P.V. Yavorskyi. Lumini package for ab initio modeling of dosimetric experiments // Problems of atomic science and technology(PAST) ISSN 1562-6016. 2024(5), pp. 154–160
- 2. P.V. Yavorskyi, O.M. Pop, V.T. Maslyuk. Sensory abilities of dosimetric materials under conditions of parameter fluctuations: Monte Carlo method // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics 2024. 27(4), pp. 450–456

- 3. P.V. Yavorskyi, O.M. Pop, V.T. Maslyuk, N.I. Svatiuk, A.V. Rusyn, V.I. Roman. Thermoluminescent dosimetry of mixed nuclear radiation: Radioisotope stands. // Semiconductor Physics, Quantum Electronics & Optoelectronics 2025. 28(2), pp. 158–165

**Наукова (науково-технічна) продукція:** програмні продукти, програмно-технологічна документація

**Соціально-економічна спрямованість:**

**Охоронні документи на ОПІВ:**

**Впровадження результатів дисертації:** Впроваджено

**Зв'язок з науковими темами:** 0118U005514; 0121U100676; 0124U004305; 0124U000962; 0124U001974

## VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Маслюк Володимир Трохимович

2. Volodymyr T. Maslyuk

**Кваліфікація:** д.ф.-м.н., професор, 01.04.10

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0002-5933-8394

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут електронної фізики Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05540008

**Місцезнаходження:** вул. Університетська, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

## VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Міца Олександр Володимирович

2. Oleksandr Mitsa

**Кваліфікація:** д. т. н., професор, 01.05.02

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0002-6958-0870

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

**Код за ЄДРПОУ:** 02070832

**Місцезнаходження:** вул. Підгірна, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Міністерство освіти і науки України

**Ідентифікатор ROR:**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Казарінов Юрій Геннадійович
2. Yurii Kazarinov

**Кваліфікація:** к. ф.-м. н., с.д., 01.04.10

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0001-5143-8545

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Національний науковий центр "Харківський фізико-технічний інститут" Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 14312223

**Місцезнаходження:** вул. Академічна, Харків, Харківський р-н., 61108, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

**Рецензенти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Гомонай Олександр Ілліч
2. Aleksandr Gomonai

**Кваліфікація:** к. ф.-м. н., с.н.с., 01.04.04

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0003-4341-699X

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут електронної фізики Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05540008

**Місцезнаходження:** вул. Університетська, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Лопушанський Василь Володимирович

2. Vasyl Lopushansky

**Кваліфікація:** к. ф.-м. н., с.н.с., 01.04.10

**Ідентифікатор ORCID ID:** 0000-0002-9821-4829

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:** Інститут електронної фізики Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05540008

**Місцезнаходження:** вул. Університетська, Ужгород, Ужгородський р-н., 88000, Україна

**Форма власності:** Державна

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:**

## VIII. Заключні відомості

| | |
|---|---|
| **Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради** | Гомоннай Олександр Васильович |
| **Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні** | Гомоннай Олександр Васильович |
| **Відповідальний за підготовку облікових документів** | Романова Людмила Георгіївна |
| **Реєстратор** | Юрченко Тетяна Анатоліївна |
| **Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності** | Юрченко Тетяна Анатоліївна |