Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0826U004718

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 20-08-2026

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кириченко Максим Миколайович
2. Maksym M. Kyrychenko

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: Теоретична та експериментальна фізика конденсованих середовищ

Дата захисту: 27-08-2026

Спеціальність за освітою: Теплофізика

Місце роботи здобувача: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: проспект Волі, Луцьк, Луцький р-н., 43025, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 15892

Повне найменування юридичної особи: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: проспект Волі, Луцьк, Луцький р-н., 43025, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

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

Повне найменування юридичної особи: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: проспект Волі, Луцьк, Луцький р-н., 43025, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29, 29.31.27, 29.19, 29.19.04, 29.31.21, 29.33.25

Тема дисертації:

1. Структурні та фізичні властивості сульфідних матеріалів на основі Ag2S, As2S3, GeS2 легованих рідкісноземельними елементами

2. Structural and physical properties of sulfide materials based on Ag2S, As2S3, GeS2 doped with rare-earth elements

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена встановленню закономірностей впливу рідкісноземельних елементів на електронну структуру, оптичні та нелінійно-оптичні властивості халькогенідних матеріалів у кристалічному та аморфному станах. Об'єктами дослідження були кристали пруситу Ag□AsS□, леговані рідкісноземельними елементами (Er, Tb, Ho, Y), та стекла системи GeS□–As□S□–Er□S□. У роботі синтезовано серію кристалів Ag□AsS□ (RE = Er, Tb, Ho, Y) з концентраціями домішок 0,3–0,9 ат.% та стекол системи GeS□–As□S□–Er□S□ з різним співвідношенням склоутворювальних компонентів і концентрацією Er□S□. Синтез матеріалів здійснювали методом прямого високотемпературного синтезу у вакуумованих кварцових ампулах. Структурний стан синтезованих матеріалів досліджено методом порошкової рентгенівської дифракції. Рентгенофазовий аналіз підтвердив однофазність кристалів Ag□AsS□ та аморфний характер стекол системи GeS□–As□S□–Er□S□. Показано, що легування рідкісноземельними елементами не призводить до руйнування кристалічної структури пруситу

та не викликає кристалізації стекол. Досліджено кристалічну структуру та особливості локального оточення рідкісноземельних іонів у халькогенідних матрицях. Встановлено, що іони RE^{3+} статистично займають катіонні позиції Ag у структурі AgAsS із формуванням локальних структурних спотворень та виникненням вакансій у катіонній підґратці для збереження електронейтральності кристала. Показано, що локальні зміни координаційного оточення призводять до виникнення областей структурного розупорядкування, які впливають на електронний спектр та оптичні властивості матеріалу. Для дослідження енергетичного спектра та електронної структури легованих кристалів AgAsS використано методи теоретичного моделювання в межах теорії функціоналу густини (DFT). Встановлено, що впровадження рідкісноземельних іонів призводить до формування локалізованих 4f-станів поблизу вершини валентної зони. Показано, що f-активні іони Er^{3+}, Tb^{3+} та Ho^{3+} формують додаткові локалізовані енергетичні рівні, які змінюють густину станів поблизу краю забороненої зони та впливають на міжзонні електронні переходи. Для іонів Y^{3+}, які не містять 4f-електронів, домінуючим є структурний механізм впливу, пов'язаний зі зміною локальної геометрії координаційних поліедрів. Для стекол системи GeS–AsS–ErS встановлено, що введення іонів Er^{3+} не порушує макроскопічної однорідності аморфної матриці, проте спричиняє локальну перебудову ближнього порядку та зміну координаційного оточення атомів у структурній сітці скла. Дослідження спектрального розподілу коефіцієнта поглинання показало, що легування рідкісноземельними елементами призводить до зміни положення краю фундаментального поглинання, ширини забороненої зони та енергії Урбаха. Для кристалів AgAsS встановлено систематичне звуження ширини забороненої зони зі зростанням концентрації домішки, найбільш виражене для Er^{3+}. Виявлено, що розмиття краю поглинання та зростання енергії Урбаха пов'язані з формуванням локалізованих домішкових станів і структурного безладу. Для стекол GeS–AsS–ErS показано, що ширина забороненої зони визначається переважно співвідношенням компонентів GeS/AsS, тоді як введення ErS сприяє формуванню хвостів щільності станів та збільшенню ступеня локального структурного розупорядкування. Проведено дослідження температурних залежностей краю фундаментального поглинання кристалів AgAsS в інтервалі температур 100–300 K. Встановлено, що швидкість температурного звуження ширини забороненої зони закономірно зростає в ряду Y < Tb ≈ Ho < Er. Показано, що посилення температурної чутливості оптичних параметрів пов'язане з інтенсифікацією електрон-фононної взаємодії внаслідок поєднання впливу локалізованих 4f-станів та індукованого домішками структурного безладу. Виявлені закономірності свідчать про можливість керування термічною стабільністю оптичних параметрів халькогенідних матеріалів шляхом вибору типу рідкісноземельного іона. У стеклах системи GeS–AsS–ErS виявлено генерацію другої та третьої гармонік. Встановлено, що фотоіндукована генерація другої гармоніки посилюється зі зменшенням ширини забороненої зони та введенням іонів Er^{3+}, які формують локальні поляризовані центри та фотоіндуковану нецентросиметричність. Показано, що генерація третьої гармоніки визначається переважно багатофотонними процесами та загальною електронною поляризовністю матриці. Отримані результати мають важливе значення для фізики твердого тіла, матеріалознавства та оптики халькогенідних напівпровідників. Встановлені закономірності впливу рідкісноземельних домішок на електронну структуру, оптичне поглинання, енергетичні рівні та нелінійно-оптичні характеристики можуть бути використані для створення нових функціональних матеріалів інфрачервоної фотоніки, оптоелектроніки та нелінійно-оптичних перетворювачів.

2. The dissertation is devoted to establishing the regularities of the influence of rare-earth elements on the electronic structure, optical and nonlinear optical properties of chalcogenide materials in crystalline and amorphous states. The objects of the study were proustite AgAsS crystals doped with rare-earth elements (Er, Tb, Ho, Y) and glasses of the GeS–AsS–ErS system. A series of AgAsS crystals (RE = Er, Tb, Ho, Y) with impurity concentrations of 0.3–0.9 at.% and glasses of the GeS–AsS–ErS system with different ratios of glass-forming components and ErS concentrations were synthesized. The materials were obtained by direct high-temperature synthesis in evacuated quartz ampoules. The structural state of the synthesized materials was studied by powder X-ray diffraction. X-ray phase analysis confirmed the single-phase character of AgAsS crystals and the amorphous nature of the GeS–AsS–ErS glasses. It was shown that rare-earth doping does not destroy the crystal structure of proustite and does not induce crystallization of the glasses. The crystal structure and features of the local

environment of rare-earth ions in chalcogenide matrices were studied. It was established that RE³□ ions statistically occupy Ag□ cationic positions in the Ag□AsS□ structure, causing local structural distortions and the formation of vacancies in the cationic sublattice to preserve the electroneutrality of the crystal. It was shown that local changes in the coordination environment lead to the formation of structurally disordered regions, which affect the electronic spectrum and optical properties of the material. To study the energy spectrum and electronic structure of doped Ag□AsS□ crystals, theoretical modelling methods within the framework of density functional theory (DFT) were used. It was found that the incorporation of rare-earth ions leads to the formation of localized 4f states near the top of the valence band. It was shown that f-active Er³□, Tb³□ and Ho³□ ions form additional localized energy levels, which modify the density of states near the band-gap edge and affect interband electronic transitions. For Y³□ ions, which do not contain 4f electrons, the dominant mechanism is structural and is associated with changes in the local geometry of coordination polyhedra. For glasses of the GeS□–As□S□–Er□S□ system, it was established that the introduction of Er³□ ions does not disturb the macroscopic homogeneity of the amorphous matrix, but causes a local rearrangement of short-range order and changes in the coordination environment of atoms in the glass network. The study of the spectral distribution of the absorption coefficient showed that rare-earth doping leads to changes in the position of the fundamental absorption edge, the band gap and the Urbach energy. For Ag□AsS□ crystals, a systematic narrowing of the band gap with increasing impurity concentration was established, with the most pronounced effect observed for Er³□. It was found that the broadening of the absorption edge and the increase in Urbach energy are associated with the formation of localized impurity states and structural disorder. For GeS□–As□S□–Er□S□ glasses, it was shown that the band gap is mainly determined by the GeS□/As□S□ ratio, while the introduction of Er□S□ promotes the formation of density-of-states tails and increases the degree of local structural disorder. Temperature dependences of the fundamental absorption edge of Ag□AsS□ crystals were studied in the temperature range of 100–300 K. It was established that the rate of temperature-induced narrowing of the band gap increases regularly in the sequence Y □ Tb ≈ Ho □ Er. It was shown that the enhanced temperature sensitivity of optical parameters is related to the intensification of electron–phonon interaction due to the combined influence of localized 4f states and impurity-induced structural disorder. The revealed regularities indicate the possibility of controlling the thermal stability of optical parameters of chalcogenide materials by selecting the type of rare-earth ion. Second and third harmonic generation was observed in glasses of the GeS□–As□S□–Er□S□ system. It was established that photoinduced second harmonic generation increases with a decrease in the band gap and with the introduction of Er³□ ions, which form local polarized centers and photoinduced noncentrosymmetry. It was shown that third harmonic generation is mainly determined by multiphoton processes and the overall electronic polarizability of the matrix. The obtained results are important for solid-state physics, materials science and the optics of chalcogenide semiconductors. The established regularities of the influence of rare-earth impurities on the electronic structure, optical absorption, energy levels and nonlinear optical characteristics can be used to create new functional materials for infrared photonics, optoelectronics and nonlinear optical converters.

Державний реєстраційний номер ДіР:

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: Освоєння нових технологій виробництва матеріалів, їх оброблення і з'єднання, створення індустрії наноматеріалів та нанотехнологій

Підсумки дослідження: Теоретичне узагальнення і вирішення важливої наукової проблеми

Публікації:

- 1. Myronchuk G., Kyrychenko M., Rakus P., Jedryka J., Taboukhat S., Guichaoua D., Sahraoui B. Rare-Earth Doping of AgGaGe□Se□: A Pathway to Multifunctional Materials for Tunable Optoelectronics // Optical

Materials. – 2026. – Vol. 174. – Art. 117966. https://doi.org/10.1016/j.optmat.2026.117966
- 2. Кириченко М., Мирончук Г., Пясецький М., Марчук О., Рудиш М. Оптичні властивості кристала Ag□AsS□ з домішками Ho // Фізика та освітні технології. – 2025. – № 2. – С. 60–68. https://doi.org/10.32782/pet-2025-2-9
- 3. Кириченко М., Рудиш М. Вплив домішок на нелінійно-оптичні властивості стекол системи GeS□–As□S□–Er□S□ // Вісник Львівського університету. Серія фізична. – 2025. – Вип. 62. – С. 43–53. https://doi.org/10.30970/vph.62.2025.43
- 4. Кириченко М., Мирончук Г. Оптичні та нелінійно-оптичні властивості стекол системи GeS□–As□S□–Er□S□ // Фізика та освітні технології. – 2024. – № 2. – С. 35–39. https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-5
- 5. Кириченко М., Мирончук Г., Марчук О. Оптичні властивості стекол системи GeS□–As□S□–Er□S□ // VI-і читання Анатолія Вадимовича Свідзинського : матеріали доповідей (м. Луцьк, 28 лютого – 01 березня 2025 р.). – Луцьк, 2025. – С. 47.
- 6. Кириченко М., Мирончук Г., Piasecki M. Структурні модифікації та їхній вплив на нелінійну оптику стекол GeS□–As□S□–Er□S□ // Актуальні проблеми фундаментальних наук : матеріали VI Міжнар. наук. конф. (Луцьк–Світязь, 9–12 червня 2025 р.). – Луцьк : Вежа-Друк, 2025. – С. 80–81
- 7. Кириченко М., Мирончук Г. Вплив домішок на нелінійно-оптичні властивості стекол системи GeS□–As□S□–Er□S□ // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики «ЕВРИКА–2025» (13–15 травня 2025 р., Львів, Україна). – Львів, 2025. – В11.
- 8. Кириченко М., Мирончук Г., Марчук О. Оптичні властивості стекол системи GeS□–As□S□ // Релаксаційні, нелінійні, акустооптичні процеси і матеріали : матеріали XII Міжнар. наук. конф. (Луцьк–Світязь, 01–04 червня 2024 р.). – Луцьк : Вежа-Друк, 2024. – С. 47–49.
- 9. Кириченко М., Мирончук Г. ІЧ-спектроскопічні дослідження стекол системи GeS□–As□S□ // Актуальні проблеми хімії, матеріалознавства та екології : матеріали IV Міжнар. наук. конф. (Луцьк, 7–9 грудня 2023 р.). – Луцьк : Вежа-Друк, 2023. – С. 104–105
- 10. Кириченко М. М. Некристалічні матеріали на основі стекол системи GeS□–As□S□ // Актуальні проблеми фундаментальних наук : матеріали V Міжнар. наук. конф. (Луцьк–Світязь, 01–05 червня 2023 р.). – Луцьк, 2023. – С. 48–50.

Наукова (науково-технічна) продукція: технології; матеріали

Соціально-економічна спрямованість: створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мирончук Галина Леонідівна

2. Halyna L. Myronchuk

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9088-3825

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: проспект Волі, Луцьк, Луцький р-н., 43025, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пясецький Міхал Войцех

2. Michal Piasecki

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-1040-8811

Додаткова інформація: https://www.researchgate.net/profile/Michal-Piasecki

Повне найменування юридичної особи: Університет імені Яна Длугоша в Ченстохові

Код за ЄДРПОУ: 5730116775

Місцезнаходження: Waszyngtona 4/8, Częstochowa, 42-200, Польща

Форма власності: Державна

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Луньов Сергій Валентинович

2. Serhii V. Lunov

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-0737-8703

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Луцький національний технічний університет

Код за ЄДРПОУ: 05477296

Місцезнаходження: вул. Львівська, Луцьк, Луцький р-н., 43018, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: 02vn54r74

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Головацький Володимир Анатолійович

2. Volodymyr A. Holovatskyi

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-5573-2562

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

Код за ЄДРПОУ: 02071240

Місцезнаходження: вул. Коцюбинського, Чернівці, 58012, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Новосад Олексій Володимирович

2. Oleksii Novosad

Кваліфікація: к. ф.-м. н., доц., 01.04.10

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9433-7776

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: проспект Волі, Луцьк, Луцький р-н., 43025, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сахнюк Василь Євгенович

2. Vasyl Y. Sakhnyuk

Кваліфікація: к. ф.-м. н., доцент, 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9225-7473

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: проспект Волі, Луцьк, Луцький р-н., 43025, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Гулай Любомир Дмитрович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Гулай Любомир Дмитрович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Кириченко Максим Миколайович
Реєстратор	Юрченко Тетяна Анатоліївна
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна

