# Облікова картка дисертації

## I. Загальні відомості

**Державний обліковий номер:** 0521U100851

**Особливі позначки:** відкрита

**Дата реєстрації:** 15-04-2021

**Статус:** Захищена

**Реквізити наказу МОН / наказу закладу:**

## II. Відомості про здобувача

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Величко Олег Володимирович
2. Velychko Oleh

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

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Вид дисертації:** доктор наук

**Аспірантура/Докторантура:** так

**Шифр наукової спеціальності:** 01.04.07

**Назва наукової спеціальності:** Фізика твердого тіла

**Галузь / галузі знань:** Не застосовується

**Освітньо-наукова програма зі спеціальності:** Не застосовується

**Дата захисту:** 07-04-2021

**Спеціальність за освітою:** Фізика

**Місце роботи здобувача:** Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

**Код за ЄДРПОУ:** 05540014

**Місцезнаходження:** вул. Свєнціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## III. Відомості про організацію, де відбувся захист

**Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради):** Д 35.156.01

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

**Код за ЄДРПОУ:** 05540014

**Місцезнаходження:** вул. Свєнціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

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

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

**Код за ЄДРПОУ:** 05540014

**Місцезнаходження:** вул. Свєнціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

**Форма власності:**

**Сфера управління:** Національна академія наук України

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## V. Відомості про дисертацію

**Мова дисертації:**

**Коди тематичних рубрик:** 29.17.21 , 29.19.03 , 29.19.15 , 29.19.35

**Тема дисертації:**

1. Застосування квантових ґраткових моделей для опису систем з адсорбованими чи інтеркальованими частинками та оптичних ґраток

2. Quantum lattice models applied to systems with adsorbed or intercalated particles and optical lattices

**Реферат/анотація:**

1. В рамках мікроскопічного модельного підходу розроблено теорію впливу таких зовнішніх факторів, як тиск, електричне поле, інтеркаляція (зміна хімічного потенціалу) та ін. на різноманітні ґраткові системи типу лад-безлад. Інтеркаляція нікелем кристалів селенідів галію й індію породжує в них електретну поляризацію. Запропоновано мікроскопічну модель типу лад-безлад, що враховує перерозподіл атомів інтеркалянта між неполярними октаедричними та полярними тетраедричними позиціями у ван-дер-ваальсових щілинах кристалів. Розраховані температурні залежності діелектричної сприйнятливості якісно відтворюють експериментальні результати для проникливості. Для інтеркальованого літієм анатазу, що використовується у літій-іонних батереях, характерно співіснування багатої та бідної на літій фаз та наявність двох можливих позицій для літію у кисневих октаедрах. Як показав проведений симетрійний аналіз, викликана

інтеркаляцією деформація гратки може супроводжуватися впорядкуванням антисегнетоелектричного типу. Для опису даної сполуки запропоновано також мікроскопічну модель, яка поєднує риси моделей Міцуї та Блюма-Емері-Гріффітса та використовує результати симетрійного аналізу. В широкому температурному діапазоні виявлено фазове розшарування на порожню та напівзаповнену фази, що цілком відповідає співіснуванню фаз у інтеркальованому кристалі. Вплив інтеркаляції на електронну зонну структуру шаруватої наногібридної сполуки типу GaSe зі стадійним впорядкуванням вивчено у модифікованій версії періодичної моделі Андерсона. Інтеркальовані частинки формують додаткову зону у вигляді вузької домішкової зони або достатньо широкої, що гібридизується з основною. Найбільш виражена зміна основної зони відбувається поблизу домішкового рівня. Досліджено перехід у фазу з бозе-конденсатом у моделі Бозе-Хаббарда з двома локальними станами при перенесенні бозонів лише у збудженій зоні. Продемонстровано можливість фазового розшарування на нормальну фазу і фазу з бозе-конденсатом за фіксованої середньої концентрації бозонів. З метою врахування неергодичності одночастинкову спектральну густину отримано в наближенні хаотичних фаз за допомогою температурних бозонних функцій Гріна. Неергодичний внесок до функції розподілу частинок за імпульсом суттєво наростає і стає співмірним з ергодичною частиною в надплинній фазі біля трикритичної точки. Досліджено зонний спектр бозе-атомів у двовимірних гексагональних оптичних ґратках із структурою типу графену. У наближенні хаотичних фаз розраховано для нормальної фази закони дисперсії в зонах та одночастинкові спектральні густини. Для ґратки з енергетично еквівалентними вузлами отримано температурно залежний безщілинний спектр з точками Дірака на краю зони Бріллюена. Вивчено енергетичний спектр системи бозе-атомів у надплинній фазі в оптичних ґратках типу графену. Досліджено спектр колективних збуджень фононного типу в системі бозе-атомів у оптичній ґратці. Використано дворівневу модель, яка приймає до уваги переходи бозонів між основним і першим збудженим станом у потенціальних ямах, а також взаємодію між ними. Показано, що спектр збуджень складається у нормальній фазі з однієї зони екситонного типу, в той час як у фазі з бозе-конденсатом виникає додаткова зона. Вивчено можливість модуляції з подвоєнням періоду ґратки, а також однорідного зміщення частинок з рівноважних позицій. Ефекти, породжені зовнішнім тиском у кристалі SnPS, вивчено у рамках деформовної моделі Блюма-Емері-Гріффітса, яка відповідає локальному потенціалу з трьома мінімумами. Встановлено наявність аномалій в області сегнетоелектричних фазових переходів першого та другого роду, а також критичної точки; вивчено поведінку об'ємної стисливості для цих випадків. Для опису діелектричних властивостей сегнетової солі запропоновано чотирипідграткову модифікацію моделі Міцуї, яка враховує симетрійні особливості гратки та просторову орієнтацію ефективних диполів. Вивчено вплив поперечного електричного поля на поляризацію, зсув точок фазових переходів та аномалії діелектричної сприйнятливості.

2. In the microscopic model approach a range of theoretical descriptions were developed considering the effect of such external factors as pressure, electric field, intercalation (change of chemical potential), etc., on various order-disorder lattice objects. Intercalation of gallium and indium selenide crystals by nickel initiates their electret polarization. A microscopic model of order-disorder type has been proposed that considers redistribution of intercalant atoms between non-polar octahedral and polar tetrahedral positions in the crystal van der Waals gaps. The calculated temperature dependences of dielectric susceptibility qualitatively reproduce experimental results for permittivity. Lithium intercalated anatase used in Li-ion batteries has some special features: coexistence of Li-rich and Li-poor phases as well as two possible positions for Li ions in the oxygen tetrahedron. As shown by the performed symmetry analysis, the intercalation induced lattice deformation can be accompanied by the ordering of antiferroelectric type. A microscopic model for description of the compound is also proposed which combines features of the Mitsui and Blume-Emery-Griffits models and utilizes the symmetry analysis results. A phase separation into the empty and half-filled phases in a wide temperature range has been found closely resembling the phase coexistence in the intercalated crystal. Influence of intercalation on the electronic band structure of the layered nanohybrid compound of the GaSe-type with a stage ordering is studied in the modified version of the periodic Anderson model. Intercalated particles form an additional band like the narrow impurity band or the more extended band hybridized with the main one. The most pronounced transformation of the main band takes place

in the vicinity of the impurity level. Phase transition into the phase with the Bose-Einstein condensate in the Bose-Hubbard model with two local states and the particle hopping in the excited band only is investigated. A possibility of separation on the normal phase and the phase with the BE condensate at the fixed average concentration of bosons is demonstrated. For consideration of the non-ergodicity, the single-particle spectral density is calculated in the random phase approximation by means of the temperature boson Green functions. The non-ergodic contribution to the momentum distribution function of particles increases significantly and becomes comparable with the ergodic one in the superfluid phase near the tricritical point. The band spectrum of Bose-atoms in two-dimensional hexagonal optical lattices with the graphene type structure is investigated. The temperature-dependent gapless spectrum with Dirac points placed on the border of Brillouin zone is obtained for the lattice with energetically equivalent sites. Energy spectrum of superfluid phase of the Bose-atom system in the optical lattices of the graphene type is investigated. The spectrum of phonon-like collective excitations in the system of Bose-atoms in optical lattice is investigated. The two-level model taking into account the transitions of bosons between the ground state and the first excited state in potential wells, as well as interaction between them, is used. It is shown that excitation spectrum in normal phase consists of the one exciton-like band, while in the phase with BE condensate an additional band appears. A possibility of modulation, which doubles the lattice constant, as well as the uniform displacement of particles from equilibrium positions are studied. The effects, taking place under external pressure in the SnPS crystal, are investigated in the framework of the deformable Blume-Emery-Griffiths model corresponding to the local potential with three minima. The presence of anomalies in the regions of ferroelectric phase transitions of the first and second order as well as the tricritical point is established; the behaviour of the volume compressibility in these cases is investigated. A simple four-sublattice order-disorder model is proposed for description of dielectric properties of the Rochelle salt crystal. Symmetry properties of the lattice and spatial orientations of effective dipoles are taken into account. An effect of the transverse electric field on spontaneous polarization, shifts of the phase transition points and dielectric susceptibility anomalies is studied.

**Державний реєстраційний номер ДіР:**

**Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:**

**Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:**

**Підсумки дослідження:**

**Публікації:**

**Наукова (науково-технічна) продукція:**

**Соціально-економічна спрямованість:**

**Охоронні документи на ОПІВ:**

**Впровадження результатів дисертації:**

**Зв'язок з науковими темами:**

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

### Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Стасюк Ігор Васильович

2. Stasyuk Ihor V.

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

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Стасюк Ігор Васильович

2. Stasyuk Ihor V.

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

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

## VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

**Офіційні опоненти**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Товстюк Наталія Корніївна

2. Tovstyuk Nataliya K.

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

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Височанський Юліан Миронович

2. Vysochanskii Yulian M.

**Кваліфікація:** д. ф.-м. н., 01.04.07, 01.04.10

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові:**

1. Ровенчак Андрій Адамович

2. Rovenchak Andrij A.

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

**Ідентифікатор ORCID ID:** Не застосовується

**Додаткова інформація:**

**Повне найменування юридичної особи:**

**Код за ЄДРПОУ:**

**Місцезнаходження:**

**Форма власності:**

**Сфера управління:**

**Ідентифікатор ROR:** Не застосовується

**Рецензенти**

## VIII. Заключні відомості

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради** Мриглод Ігор Миронович

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні**

Мриглод Ігор Миронович

**Відповідальний за підготовку облікових документів**

**Реєстратор**

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності**




Юрченко Т.А.