

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U003168

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 25-07-2025

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. МЕЛЬНИЧУК ТАРАС ОЛЕГОВИЧ

2. Taras Melnychuk

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: 27-08-2025

Спеціальність за освітою: 104 Фізика та астрономія

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 10143

Повне найменування юридичної особи: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: проспект Волі, буд. 13, 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, буд. 13, 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: 29.19, 29.19.21

Тема дисертації:

1. Фотостимульовані процеси в кристалах $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ легованих Dy, Nd, Er
2. Photostimulated processes in $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ crystals doped with Dy, Nd, Er.

Реферат:

1. Кваліфікаційна наукова праця Мельничук Т.О., присвячена розв'язанню актуальної задачі матеріалознавства – дослідженню впливу легування рідкісноземельними елементами (РЗЕ) на фізичні властивості халькогенідних кристалів $\text{AgGaGe}_n\text{Se}_8$ та визначенню їхнього потенціалу для застосування в оптоелектронних пристроях. Робота виконана у Волинському національному університеті імені Лесі Українки, Луцьк, 2025. Пошук нових функціональних матеріалів для інфрачервоної фотоніки та нелінійної оптики є критично важливим. Існуючі комерційні кристали, такі як AgGaSb чи ZnGeP_2 , мають обмеження, зокрема низький поріг лазерного пошкодження. Кристали $\text{AgGaGe}_n\text{Se}_8$ є перспективною альтернативою, проте вплив легування РЗЕ на їхні властивості залишався недостатньо вивченим. Ця дисертація заповнює цю прогалину, комплексно досліджуючи фотостимульовані процеси в легованих кристалах. Метою роботи було встановлення потенціалу застосування кристалів $\text{AgGaGe}_n\text{Se}_8$, легованих іонами Nd, Dy та Er, в оптоелектронних пристроях. Для її досягнення були вирішені сім ключових завдань, що охоплювали дослідження впливу легування на структурні, коливальні, оптичні, фотоелектричні, п'єзоелектричні та

нелінійно-оптичні властивості. Наукова новизна роботи полягає в наступному: • Вперше проведено комплексне дослідження впливу легування РЗЕ на весь спектр фізичних властивостей кристалів AgGaGeSn . • Встановлено кількісні закономірності зміни ширини забороненої зони та статичного розупорядкування. • Запропоновано фізичний механізм посилення домішкової фотопровідності. • Доведено можливість керування п'єзоелектричними та нелінійно-оптичними властивостями шляхом легування. Практичне значення результатів полягає в обґрунтуванні перспективності використання цих матеріалів для розробки нових оптоелектронних елементів, зокрема керованих сенсорів та перетворювачів частоти для середнього ІЧ-діапазону. У роботі використано комплекс сучасних експериментальних методик: синтез кристалів методом Бріджмена-Стокбаргера; електронна мікроскопія та електронно-зондовий мікроаналіз для контролю морфології та хімічної однорідності; спектроскопія комбінаційного розсіювання та інфрачервона Фур'є-спектрометрія для аналізу оптичних та коливальних властивостей; дослідження краю оптичного поглинання для визначення ширини забороненої зони; вивчення фотопровідності за допомогою електрометра; дослідження п'єзоелектричних властивостей та їхньої залежності від температури і лазерного опромінення; оцінка нелінійно-оптичних властивостей (генерації другої гармоніки) за методикою порошку Куртца-Перрі. Комплексний аналіз впливу легування на фізичні властивості кристалів AgGaGeSn показав наступне: легування іонами Nd, Dy та Er не змінює кристалічної структури, проте індукує локальні спотворення та напруження в ґратці, зберігаючи високу хімічну однорідність. Ці структурні зміни впливають на коливальні властивості, хоча основні коливальні моди зберігаються. Леговані кристали зберігають високу прозорість (понад 70%) у діапазоні 2–15 мкм. Легування РЗЕ призводить до зменшення ширини забороненої зони (від 2.25 eV до 2.20 eV для зразка з Er) та збільшення статичного розупорядкування. Дослідження фотопровідності виявили перерозподіл інтенсивностей на користь домішкового максимуму, що пояснюється утворенням додаткових акцепторних центрів (вакансій срібла). П'єзоелектричний коефіцієнт d_{pp} зростає при легуванні Dy та Er (до 35 пм/В) і може ефективно керуватися температурою та лазерним опроміненням. Легування РЗЕ позитивно впливає на нелінійно-оптичний відгук, підвищуючи інтенсивність генерації другої гармоніки (ГДГ), що корелює зі зменшенням ширини забороненої зони та посиленням ацентричності структури. Проведені дослідження довели, що цілеспрямоване легування кристалів AgGaGeSn іонами рідкісноземельних елементів є ефективним інструментом для керування їхніми структурними, оптичними, п'єзоелектричними та нелінійно-оптичними властивостями. Виявлене підвищення інтенсивності ГДГ у поєднанні з широким вікном прозорості в середньому ІЧ-діапазоні та високим порогом лазерного пошкодження робить ці матеріали перспективною основою для розробки ефективних перетворювачів частоти. Можливість змінювати п'єзоелектричний коефіцієнт під дією лазерного опромінення є прямою фізичною основою для створення оптично керованих сенсорів тиску або деформації. Крім того, ця властивість, разом із фотоіндукованими змінами фотопровідності, відкриває перспективи для розробки нових модуляторів оптичних сигналів. Таким чином, результати роботи не лише підтверджують загальну перспективність легованих кристалів AgGaGeSn , але й надають науково обґрунтовану базу для їх цільової розробки як активних середовищ для сучасної інфрачервоної фотоніки та сенсорики.

2. This qualification scientific work by T.O. Melnychuk is dedicated to solving a pressing problem in materials science: investigating the effect of rare-earth element (REE) doping on the physical properties of AgGaGeSn chalcogenide crystals and determining their potential for application in optoelectronic devices. The work was carried out at Lesya Ukrainka Volyn National University, Lutsk, in 2025. The search for new functional materials for infrared photonics and nonlinear optics is critically important. Existing commercial crystals, such as AgGaSn or ZnGePn , have limitations, particularly a low laser damage threshold. AgGaGeSn crystals are a promising alternative, but the effect of REE doping on their properties has remained insufficiently studied. This dissertation fills that gap by comprehensively investigating photostimulated processes in doped crystals. The aim of the work was to establish the potential for using AgGaGeSn crystals, doped with Nd, Dy, and Er ions, in optoelectronic devices. To achieve this, seven key tasks were addressed, encompassing the study of doping effects on structural, vibrational, optical, photoelectric, piezoelectric, and nonlinear optical properties. The scientific novelty of the work lies in the following: • For the first time, a comprehensive study of the effect of REE doping on the full spectrum of physical

properties of AgGaGe₃Se₈ crystals has been conducted. • Quantitative regularities of changes in the band gap width and static disorder have been established. • A physical mechanism for the enhancement of extrinsic photoconductivity has been proposed. • The possibility of controlling piezoelectric and nonlinear optical properties through doping has been proven. The practical significance of the results lies in substantiating the prospects of using these materials for developing new optoelectronic elements, particularly controlled sensors and frequency converters for the mid-infrared range. The work employed a comprehensive set of modern experimental techniques: crystal synthesis by the Bridgman–Stockbarger method; electron microscopy and electron–probe microanalysis for morphology and chemical homogeneity control; Raman spectroscopy and Fourier-transform infrared spectrometry for optical and vibrational property analysis; optical absorption edge studies to determine the band gap width; photoconductivity measurements using an electrometer; piezoelectric property investigations and their dependence on temperature and laser irradiation; and nonlinear optical property assessment (second harmonic generation) using the Kurtz–Perry powder method. A comprehensive analysis of the effect of doping on the physical properties of AgGaGe₃Se₈ crystals showed the following: Doping with Nd, Dy, and Er ions does not change the crystal structure but induces local distortions and stresses in the lattice while maintaining high chemical homogeneity. These structural changes affect vibrational properties, although the main vibrational modes are preserved. Doped crystals maintain high transparency (over 70%) in the 2–15 μm range. REE doping leads to a decrease in the band gap width (from 2.25 eV to 2.20 eV for the Er-doped sample) and an increase in static disorder. Photoconductivity studies revealed a redistribution of intensities in favor of the impurity maximum, explained by the formation of additional acceptor centers (silver vacancies). The piezoelectric coefficient d₃₃ increases with Dy and Er doping (up to 35 pC/N) and can be effectively controlled by temperature and laser irradiation. REE doping positively influences the nonlinear optical response, increasing the intensity of second harmonic generation (SHG), which correlates with the decrease in band gap width and enhancement of structural acentricity. The conducted studies have proven that targeted doping of AgGaGe₃Se₈ crystals with rare-earth element ions is an effective tool for controlling their structural, optical, piezoelectric, and nonlinear optical properties. The observed increase in SHG intensity, combined with a broad transparency window in the mid-infrared range and a high laser damage threshold, makes these materials a promising basis for developing efficient frequency converters. The ability to change the piezoelectric coefficient under laser irradiation provides a direct physical basis for creating optically controlled pressure or strain sensors. Furthermore, this property, along with photo-induced changes in photoconductivity, opens prospects for developing new optical signal modulators. Thus, the results of this work not only confirm the general promise of doped AgGaGe₃Se₈ crystals but also provide a scientifically substantiated basis for their targeted development as active media for modern infrared photonics and sensing.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

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. Melnychuk T., Myronchuk H., Rakush, P. Ozga K., Yendryka Ya., Marchuk O., Smityukh O., Yukhymchuk V., Zamuruyeva O. Structural features of the AgGaGe₃Se₈ crystal doped with Er, Dy and Nd. *Physics and Chemistry of Solid State*. 2025. 26(2), 329–334. (<https://doi.org/10.15330/pcss.26.2.329-334>) (третій квартал (Q3) за класифікацією SCImago)
- 2. Мирончук Г., Мельничук Т., Єндріка Я., Кажукаускас В. Оптичні та нелінійно-оптичні властивості кристалів AgGaGe₃Se₈, легованих Er. *Фізика та освітні технології*. 2022. 1. 41–47. (<https://doi.org/10.32782/pet-2022-1-5>).

- 3. Мельничук Т. Мирончук Г. Оптичні властивості кристалів $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ легованих Dy. Фізика та освітні технології. 2024. 2. 47–55. (<https://doi.org/10.32782/pet-2024-2-7>).
- 4. Нигматулліна О., Мельничук Т., Іванюк Д., Куршель Д. Нелінійно-оптичні застосування халькогенідних кристалів. Матеріали Школи-конференції молодих вчених. Сучасне матеріалознавство: фізика, хімія, технології (СМФХТ – 2021), Ужгород. (4–8 жовтня 2021 р.). с. 140 – 141.
- 5. Мельничук Т., Мирончук Г.Л. Лазерно – стимульовані ефекти в напівпровідниках. Матеріали IV Міжнародної науково-практичної конференції «Актуальні проблеми розвитку природничих та гуманітарних наук – 11 листопада 2021р.» с. 206 – 207.
- 6. Мельничук Т., Мирончук Г., Куршель Д., Шафарчук В. Оптичні та нелінійно-оптичні властивості кристалів $\text{AgGaGe}_4\text{S}_4$, легованих Er. Матеріали: VII Всеукраїнської науково-практичної конференції здобувачів вищої освіти та молодих вчених «Фізика і хімія твердого тіла. Стан, досягнення і перспективи» 21–22 жовтня 2022 р. с. 28.
- 7. Мирончук Г.Л., Мельничук Т.О., Мельничук К Оптико-спектральні характеристики кристалів $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ легованих рідкоземельними металами. Релаксаційно, нелінійно, акустооптичні процеси і матеріали: матеріали XI Міжнар. наук. конф., 1–5 черв. 2022 р. Луцьк: Вежа-Друк, 2022. С. 141-142.
- 8. Мельничук Т. О., Мирончук Г. Л. Оптичні властивості кристалів $\text{AgGaGe}_3\text{Se}_8$ легованих Nd, Dy, Er, Lu. Матеріали: Міжнародної конференції студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики, ЄВРИКА–2023. Львів. 16–18 травня. В14
- 9. Myronchuk G., Melnychuk T. Photoinduced piezoelectricity in chalcogenides doped crystals. VI Polish-Lithuanian-Ukrainian Meeting on Physics of Ferroelectrics Czestochowa, 11-15 September 2023.
- 10. Мирончук Г., Понедельник С., Мельничук Т., Куршель Д. Фотоіндуковані ефекти першого порядку в халькогенідних системах $\text{Ag-Ga(In)-Si(Ge)-S(Se)}$. Фізика та освітні технології, 2021. (2). 43–49.

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 ОПВ:

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. Galyna Myronchuk

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-9088-3825

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 36245422900

Повне найменування юридичної особи: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: проспект Волі, буд. 13, Луцьк, Луцький р-н., 43025, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Луньов Сергій Валентинович
2. Serhii 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, буд. 75, Луцьк, Луцький р-н., 43018, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Головацький Володимир Анатолійович
2. Volodymyr Holovatsky

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, буд. 2, 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, буд. 13, 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. Кевшин Андрій Григорович

2. Andrii Kevshyn

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-3581-8852

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Волинський національний університет імені Лесі Українки

Код за ЄДРПОУ: 02125102

Місцезнаходження: проспект Волі, буд. 13, 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**

Пастернак Ярослав Михайлович

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

Пастернак Ярослав Михайлович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Ліповська-Маковецька Наталія Іванівна

Реєстратор

УкрІНТЕІ

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна