Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0826U004318

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 05-08-2026

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Мирончук Денис Борисович
2. Denys B. Myronchuk

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: 26-08-2026

Спеціальність за освітою: 104 Фізика та астрономія

Місце роботи здобувача: Організація відсутня

Код за ЄДРПОУ: 00000000

Місцезнаходження: ------, Київ, 00000, Україна

Форма власності: Змішана

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 15860

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, 29.19

Тема дисертації:

1. Оптико-спектральні властивості кристалів Ag3SbS3, легованих рідкісноземельними металами

2. Optical-spectral properties of Ag3SbS3 crystals doped with rare earth metal

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена встановленню закономірностей формування електронної структури, оптичних та нелінійно-оптичних властивостей багатокомпонентних халькогенідних напівпровідників на основі кристалів Ag3SbS3, легованих рідкісноземельними елементами. Актуальність теми зумовлена зростаючим інтересом до халькогенідних матеріалів як перспективної основи для створення функціональних елементів оптоелектроніки, фотоніки та нелінійної оптики, а також можливістю керування їхніми фізичними властивостями шляхом домішкового легування. У роботі використано комплекс сучасних експериментальних і теоретичних методів дослідження. Зокрема, для встановлення структурних характеристик застосовано рентгеноструктурний аналіз, який дозволив визначити фазовий склад, параметри кристалічної ґратки та симетрію досліджуваних сполук. Морфологічні та елементні дослідження виконано із застосуванням скануючої електронної мікроскопії та нергодисперсійного аналізу, що дало змогу підтвердити однорідність складу та відсутність сторонніх фаз. Оптичні властивості вивчали методом спектроскопії поглинання, а нелінійно-оптичні характеристики – шляхом дослідження генерації другої

гармоніки. Теоретичне моделювання електронної структури виконано в рамках першопринципних методів на основі теорії функціоналу густини (DFT), що дозволило встановити природу міжатомної взаємодії та механізми формування енергетичних зон. Встановлено, що кристали Ag3SbS3 характеризуються складною кристалічною структурою з можливістю існування у тригональній та моноклінній модифікаціях. Показано, що зміна структурної симетрії супроводжується перебудовою зонної структури, зміною ширини забороненої зони та перерозподілом електронної густини. Виявлено, що електронна структура визначається гібридизацією s-, p- та d-станів атомів, а також характеризується змішаним іонно-ковалентним типом хімічного зв'язку. Досліджено вплив легування рідкісноземельними елементами (La, Ce, Pr, Ho) на структурні, електронні та оптичні властивості кристалів Ag3SbS3. З'ясовано, що введення домішок має ізоморфний характер і не змінює тип кристалічної структури, однак призводить до локальних деформацій кристалічної ґратки та зміни координаційного оточення атомів. Обґрунтовано механізм входження рідкісноземельних іонів у кристалічну ґратку за схемою гетеровалентного заміщення з утворенням вакансій у катіонній підґратці. На основі квантово-механічних розрахунків встановлено, що легування призводить до формування локалізованих домішкових 4f-рівнів у забороненій зоні. Показано, що ці рівні визначають зміну оптичного поглинання та електронних характеристик матеріалу. Експериментально встановлено ефект систематичного довгохвильового зсуву краю фундаментального поглинання при збільшенні концентрації домішок, що свідчить про звуження ефективної ширини забороненої зони. Особливу увагу приділено дослідженню нелінійно-оптичних властивостей. Встановлено, що кристали Ag3SbS3 завдяки нецентросиметричній структурі проявляють генерацію другої гармоніки, а легування рідкісноземельними елементами призводить до підсилення нелінійно-оптичного відгуку. Показано, що зростання інтенсивності генерації другої гармоніки пов'язане з підвищенням нелінійної поляризовності та появою проміжних домішкових енергетичних станів. Наукова новизна одержаних результатів полягає у встановленні закономірностей впливу рідкісноземельного легування на електронну структуру та оптико-спектральні властивості кристалів Ag3SbS3, зокрема у виявленні механізмів формування локалізованих домішкових станів та їх ролі у процесах оптичного поглинання і нелінійно-оптичного відгуку. Вперше встановлено кореляцію між типом і концентрацією домішки та ефективністю генерації другої гармоніки. Практичне значення отриманих результатів полягає у можливості цілеспрямованого керування оптоелектронними та нелінійно-оптичними властивостями халькогенідних матеріалів шляхом варіювання складу і концентрації рідкісноземельних домішок, що відкриває перспективи їх використання у фотонних та оптоелектронних пристроях. Ключові слова: халькогеніди, кристалічна структура, зонна структура, електронна структура, ширина забороненої зони, локалізовані стани, рівень Фермі, леговані кристали, рідкісноземельні елементи, дефекти кристалічної гратки, оптичні властивості, нелінійно-оптичні властивості, генерація другої гармоніки, моделювання, фазові перетворення, анізотропні тверді тіла.

2. The dissertation is devoted to establishing the patterns of formation of the electronic structure, optical and nonlinear optical properties of multicomponent chalcogenide semiconductors based on Ag3SbS3 crystals doped with rare-earth elements. The relevance of the study is caused by the growing interest in chalcogenide materials as a promising platform for optoelectronics, photonics, and nonlinear optics, as well as by the possibility of tuning their functional properties via controlled doping. A comprehensive approach combining modern experimental techniques and theoretical modeling was employed. Structural properties were investigated using X-ray diffraction, which allowed determination of phase composition, crystal structure, and symmetry of the studied compounds. Morphology and elemental composition were analyzed by scanning electron microscopy and energy-dispersive analysis, confirming homogeneity and the absence of secondary phases. Optical properties were studied by absorption spectroscopy, while nonlinear optical response was investigated via second harmonic generation. First-principles density functional theory (DFT) calculations were performed to analyze the electronic structure, band structure formation, and the nature of interatomic interactions. It is established that Ag3SbS3 crystals possess complex crystal structure with trigonal and monoclinic phases. Structural phase transformations lead to reconstruction of the band structure, variation of the band gap, and redistribution of the electronic density. The electronic structure is determined by hybridization of s-, p-, and d-states and is characterized by mixed ionic-

covalent bonding. The effect of rare-earth doping (La, Ce, Pr, Ho) on structural, electronic, and optical properties has been investigated. It is shown that doped crystals preserve the crystal structure type, while doping induces local lattice distortions, defects in the crystal lattice, and changes in the coordination environment. The mechanism of heterovalent substitution with formation of cation vacancies is substantiated. Based on first-principles calculations, it is shown that doping leads to the formation of localized 4f-levels within the band gap. These localized states determine the modification of optical absorption and electronic properties. A systematic red shift of the fundamental absorption edge with increasing dopant concentration is experimentally observed, indicating band gap narrowing. Particular attention is paid to nonlinear optical properties. It is established that Ag3SbS3 crystals, due to their non-centrosymmetric structure, exhibit second harmonic generation. Rare-earth doping enhances the nonlinear optical response due to increased nonlinear polarizability and the presence of intermediate impurity states. Scientific novelty consists in establishing the relationship between rare-earth doping and the electronic structure, band structure, and optical properties of Ag3SbS3 crystals, as well as in revealing the role of localized impurity states in optical absorption and nonlinear optical processes. For the first time, a correlation between dopant type and concentration and the efficiency of second harmonic generation is established. Practical significance lies in the possibility of controlled tuning of optoelectronic, electrophysical, and nonlinear optical properties of chalcogenide materials by varying dopant composition and concentration, which makes them promising for applications in optoelectronic and photonic devices. Keywords: chalcogenides, crystal structure, band structure, electronic structure, band gap, localized states, Fermi level, doped crystals, rare-earth elements, crystal lattice defects, optical properties, nonlinear optical properties, second harmonic generation, modeling, phase transformations, anisotropic solids.

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:

- T. V. Vu, O. V. Marchuk, O. V. Smitiukh, V. A. Tkach, D. Myronchuk, G. L. Myronchuk, and O. Y. Khyzhun, “High-temperature orthorhombic phase of Cu2HgGeS4: Electronic structure and principal optical constants as evidenced from the experiment and theory,” J. Solid State Chem., vol. 313, p. 123313, 2022. (https://doi.org/10.1016/j.jssc.2022.123313)
- M. Ya. Rudysh, G. L. Myronchuk, A. O. Fedorchuk, O. V. Marchuk, V. M. Kordan, O. P. Kohan, D. B. Myronchuk, and O. V. Smitiukh, “Electronic structure and optical properties of the Ag3SbS3 crystal: Experimental and DFT studies,” Phys. Chem. Chem. Phys., vol. 25, pp. 22900–22912, 2023. (https://doi.org/10.1039/D3CP02333H)
- M. Rudysh, H. Myronchuk, M. Piasetskyi, R. Matviiv, and D. Myronchuk, “Електрона будова і оптичні спектри кристала Ag3SbS3 у моноклінній фазі,” Fizyka ta osvitni tekhnolohii, no. 1, pp. 37–47, 2024. (https://doi.org/10.32782/pet-2024-1-5)
- Д. Мирончук, А. Кевшин, О. Марчук, Д. Іванюк, “Синтез та властивості кристалів Ag3SbS3, легованих празеодимом,” Фізика та освітні технології, no. 2, pp. 78–85, 2025. (https://doi.org/10.32782/pet-2025-2-11).
- V. A. Tkach, O. V. Marchuk, O. V. Smitiukh, G. L. Myronchuk, D. Myronchuk, O. O. Foya, N. M. Denysyuk, K. I. Kopylova, and O. Y. Khyzhun, “XPS studies of the electronic structure of Cu2HgGeS4,” in Relaksiino, neliniino, akustooptychni protsesy i materialy: Proc. XI Int. Conf., Lutsk–Svityaz, Ukraine, 2022, pp. 81–82.
- I. V. Luzhnyi, G. L. Myronchuk, D. Myronchuk, V. L. Bekenev, N. M. Denysyuk, K. I. Kopylova, O. V. Marchuk, and O. Y. Khyzhun, “Electronic structure of Tl4PbI6 crystal: XPS measurements and first-principles band-structure calculations,” in Relaksiino, neliniino, akustooptychni protsesy i materialy: Proc. XI Int. Conf.,

Lutsk–Svityaz, Ukraine, 2022, pp. 76–78.
- M. Ya. Rudysh, D. Myronchuk, A. Ryzhuk, S. Ponedelnik, and M. Piasetskyi, “Zonna struktura krystaliv Ag3AsS3,” in Relaksiino, neliniino, akustooptychni protsesy i materialy: Proc. XI Int. Conf., Lutsk–Svityaz, Ukraine, 2022, pp. 142– 143.
- D. Myronchuk, A. Kevshyn, and D. Kurshel, “Osoblyvosti struktury ta spektralnoho rozpodilu koefitsiienta pohlynannia krystalu Ag3SbS3,” in Proc. Int Conf. Students and Young Scientists on Theoretical and Experimental Physics “HEUREKA-2023”, Lviv, Ukraine, 2023, p. A1.
- M. Rudysh, D. Myronchuk, and A. Kevshyn, “Elektronna budova ta optychni vlastyvosti krystala Ag3SbS3 u monoklinnii fazi,” in Proc. Int. Conf. Students and Young Scientists on Theoretical and Experimental Physics “HEUREKA-2025”, Lviv, Ukraine, 2025, p. B29.
- Рижук, А., Понедельнік, С., Мирончук, Д., & Шигорін, О. (2021). Нелінійно-оптичні властивості монокристалу AgGaGeSe8:Lu. У Матеріали Школи-конференції молодих вчених «Сучасне матеріалознавство: фізика, хімія, технології (СМФХТ – 2021)» (с. 285–286). ФОП Сабов А. М.

Наукова (науково-технічна) продукція: 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: 0122U000944

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Рудиш Мирон Ярославович
2. Myron Y. Rudysh

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

Ідентифікатор ORCID ID: 000-0002-5431-5652

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, Львів, 79000, 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, 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 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. Гулай Любомир Дмитрович

2. Lubomir D. Gulay

Кваліфікація: д. х. н., професор, 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3495-5027

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 7004458695; Web of Science Researcher ID: P-9761-2019; https://scholar.google.com/citations?user=xeAQq2cAAAAJ&hl

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 Пастернак Ярослав Михайлович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Пастернак Ярослав Михайлович

Відповідальний за підготовку облікових документів Мирончук Денис Борисович

Реєстратор Юрченко Тетяна Анатоліївна

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Тетяна Анатоліївна