

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0824U001641

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-04-2024

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ Ректора Львівського національного університету імені Івана Франка від 01.4.06.2024 р. № 820



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Горон Богдан Ігорович

2. Bohdan I. Horon

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-4595-5789

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 105

Назва наукової спеціальності: Прикладна фізика та наноматеріали

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Прикладна фізика та наноматеріали

Дата захисту: 16-05-2024

Спеціальність за освітою: Прикладна фізика та наноматеріали

Місце роботи здобувача: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, 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): ДФ 35.051.167_ID 5021

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, 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: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.03.31, 29.03.77, 29.19.15, 29.31.21

Тема дисертації:

1. Оптико-електронні параметри кристалів фторберилату амонію.
2. Optical and electronic parameters of ammonium fluoroberyllate crystals.

Реферат:

1. Дисертаційна робота присвячена з'ясуванню теоретично та експериментально отриманих оптичних і електронних параметрів, а також аналізу характеру фазових переходів з параелектричної в несумірну та з несумірної в сегнетоелектричну фази кристалів фторберилату амонію. Встановлено, що як в сегнетоелектричній, так і в параелектричній фазі дно зони провідності утворюють s-стани берилію, а вершину зони провідності — p-стани фтору; дно зони провідності та вершина зони валентності в обох фазах знаходяться в центрі зони Брілюена; під впливом одновісного тиску в ІЧ-спектрах відбивання значних зміщень зазнають лише смуги, які відповідають коливанням тетраєдрів BeF₄; в кристалах фторберилату квазіізотропні точки існують як в сегнетоелектричній, так і в параелектричній фазі, їхні температурні положення слабо залежать від довжини хвилі; показники заломлення та двопроменезаломлення поводяться аномально лише при переході з параелектричної в неспівмірну фазу; аномалія в температурній поведінці діелектричної проникності існує тільки при переході з неспівмірної в сегнетоелектричну фазу; за

величиною найбільших п'єзооптичних коефіцієнтів кристали фторберилату варто віднести до кращих акустооптичних матеріалів для ультрафіолетової області. Продемонстровано, що найкраще поведінку діелектричної проникності в неспівмірній фазі і в області фазового переходу з неспівмірної в сегнетоелектричну фазу описує модель Леванюка–Саннікова. Це реалізовано виконанням головних завдань дисертаційної роботи: синтезування кристалів фторберилату амонію; обрахунок зонно-енергетичної структури, повної та парціальної густин станів, оптичних властивостей кристалів фторберилату амонію в параелектричній та сегнетоелектричній фазах за допомогою теорії функціоналу густини; вимірювання спектральної поведінки дзеркального відбивання в інфрачервоній ділянці спектру для механічно вільного та одновісно затиснутого кристала фторберилату амонію; проведення апроксимації даних щодо діелектричної проникності поблизу фазових переходів у кристалах фторберилату амонію за допомогою існуючих моделей, які описують термодинамічну поведінку кристалів фторберилату амонію; з'ясування характеру поведінки діелектричної проникності в області фазових переходів у рамках існуючих феноменологічних моделей.

2. The thesis is devoted to the elucidation of theoretically and experimentally obtained optical and electronic parameters, as well as the analysis of the nature of phase transitions from the paraelectric to the incommensurable and from the incommensurable to the ferroelectric phase of ammonium fluoroberyllate crystals. It was established that both in the ferroelectric and in the paraelectric phase, the bottom of the conduction zone is formed by the s-states of beryllium, and the top of the conduction zone by the p-states of fluorine; the bottom of the conduction band and the top of the valence band in both phases are in the center of the Brillouin zone; under the influence of uniaxial pressure, only the bands corresponding to the vibrations of the BeF₄ tetrahedra undergo significant shifts in the IR reflection spectra; in fluoroberyllate crystals, quasi-isotropic points exist both in the ferroelectric and in the paraelectric phase, their temperature positions weakly depend on the wavelength; indices of refraction and birefringence behave abnormally only at the transition from the paraelectric to the incommensurate phase; an anomaly in the temperature behavior of the dielectric constant exists only at the transition from the incommensurate to the ferroelectric phase; by the value of the largest piezo-optic coefficients, fluoroberyllate crystals should be considered among the best acousto-optic materials for the ultraviolet region. It has been demonstrated that the Levanyuk–Sannikov model best describes the behavior of the dielectric constant in the incommensurate phase and in the region of the phase transition from the incommensurate to the ferroelectric phase. This was realized by fulfilling the main tasks of the thesis: synthesizing ammonium fluoroberyllate crystals; calculation of the band structure, full and partial densities of states, optical properties of ammonium fluoroberyllate crystals in the paraelectric and ferroelectric phases using density functional theory; measurement of spectral behavior of specular reflection in the infrared region of the spectrum for a mechanically free and uniaxially clamped ammonium fluoroberyllate crystal; approximation of data on dielectric constant near phase transitions in ammonium fluoroberyllate crystals using existing models that describe the thermodynamic behavior of ammonium fluoroberyllate crystals; elucidation of the behavior of the dielectric constant in the area of phase transitions within the existing phenomenological models.

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: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- 1. Horon B., Kushnir O., Shchepanskyi P., Stadnyk V. Temperature dependence of dielectric permittivity in incommensurately modulated phase of ammonium fluoroberyllate // Condensed Matter Physics. 2022. T. 25, №3. С. 43704.

- 2. Horon B., Kushnir O., Stadnyk V. Temperature dependences of refractive indices and optical birefringence in ammonium fluoroberyllate // Ukr. J. Phys. Opt. 2023. T. 25. C. 01020.
- 3. Girnyk I., Horon B., Kapustianyk V., Kushnir O., Shopa R. Nonlinear background correlations to dielectric permittivity of ferroics and multiferroics // Condensed Matter Physics. 2023. T. 26, №4. C. 43604.
- 4. Rudysh M. Y., Fedorchuk A. O., Stadnyk V. Y., Shchepanskyi P. A., Brezvin R. S., Horon B. I., Khyzhun O. Y., Gorina O. M. Structure, electronic, optical and elastic properties of $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ crystals in paraelectric phase // Current Applied Physics. 2023. T. 45. C. 76–85.
- 5. Rudysh M., Horon B., Shchepanskyi P., Stadnyk V., Brezvin R. First principles calculation of band structure and physical properties of ferroelectric $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ crystal // 2021 IEEE 12th International Conference on Electronics and Information Technologies (ELIT) Proceedings, 2021. C. 310–314.
- 6. Horon B., Kushnir O., Stadnyk V., Kashuba A. Least-squares analysis of the dielectric permittivity for improper ferroelectric ammonium fluoroberyllate // 2021 IEEE 12th International Conference on Electronics and Information Technologies (ELIT) Proceedings, 2021. C. 261–264.
- 7. Горон Б., Рудиш М., Стадник В., Брезвін Р., Щепанський П., Матвіїшин І. Вплив одновісного стискування на інфрачервоні спектри кристала $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ // Вісник Львівського університету. Серія фізична. 2022. Т. 59. С. 53–60.
- 8. Мицик Б., Горон Б., Дем'янишин Н., Стадник В., Щепанський П., Кость Я. Пружнооптичні властивості кристалів фторберилату амонію // Вісник Львівського університету. Серія фізична. 2023. Т. 60. С. 90–100.
- 9. Horon B., Kushnir O., Stadnyk V. Comparison of Levanyuk–Sannikov and Prelovšek–Levstik–Fillipič model for incommensurate–ferroelectric phase transition in ammonium fluoroberyllate // XI International Seminar «Properties of ferroelectric and superionic systems». Uzhhorod, 2022.
- 10. Horon B., Kushnir O., Stadnyk V., Rudysh M. Influence of structural defects on incommensurate–ferroelectric phase transition in ammonium fluoroberyllate // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики «Єврика-2022». Львів, 2022.
- 11. Горон Б., Рудиш М., Стадник В., Щепанський П. Інфрачервоні спектри кристалів $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ // VII Всеукраїнська науково-практична конференція здобувачів вищої освіти та молодих вчених «Фізика і хімія твердого тіла: стан, досягнення і перспективи». Луцьк, 2022.
- 12. Horon B. I., Stadnyk V. Y., Kushnir O. S. Refractive indices of ammonium fluoroberyllate crystals in a wide range of temperatures // Proceedings of XI International Conference «Relaxed, Nonlinear and Acoustic Optical Processes and Materials». Lutsk, 2022.
- 13. Horon B., Kushnir O., Stadnyk V. Measurements of optical anisotropy of ferroelectric fluoroberyllate crystals // XII International Seminar «Properties of ferroelectric and superionic systems». Uzhhorod, 2023.

Наукова (науково-технічна) продукція: матеріали

Соціально-економічна спрямованість: економія матеріалів

Охоронні документи на ОПВ:

Впровадження результатів дисертації: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: № 0120U102320

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Стадник Василь Йосифович

2. Vasyl Y. Stadnyk

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-7820-7886

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 35615288600; Web of Science Researcher ID: E-4578-2019;
<https://scholar.google.com.ua/citations?hl=uk&user=82Ak5jsAAAAJ>

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, 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. Настишин Юрій Адамович
2. Yuriy A. Nastishin

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.05

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-7521-3906

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 6701775232; Web of Science Researcher ID: C-6631-2019;
https://scholar.google.com.ua/citations?hl=uk&user=_ys9ajUAAAAJ

Повне найменування юридичної особи: Національна академія сухопутних військ імені гетьмана Петра Сагайдачного

Код за ЄДРПОУ: 08410370

Місцезнаходження: вул. Героїв Майдану, буд. 32, Львів, 79012, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство оборони України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Столярчук Ігор Дмитрович
2. Ihor D. Stolyarchuk

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-7549-2335

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 6602497078; Web of Science Researcher ID: AAX-8198-2020;
<https://scholar.google.com.ua/citations?hl=uk&user=GYytOgMAAAAJ>

Повне найменування юридичної особи: Дрогобицький державний педагогічний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02125438

Місцезнаходження: вул. Івана Франка, буд. 24, Дрогобич, Дрогобицький р-н., 82100, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Свелеба Сергій Андрійович

2. Serhiy A. Sveleba

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-0823-910X

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 6701870733; Web of Science Researcher ID: K-2792-2014;
<https://scholar.google.com.ua/citations?user=GdC2aZcAAAAJ>

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Карбовник Іван Дмитрович

2. Ivan D. Karbovnyk

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-3697-4902

Додаткова інформація: Scopus Author ID: 55911323100; Web of Science Researcher ID: B-8572-2009;
<https://scholar.google.com.ua/citations?hl=uk&user=tZ5Kt34AAAAJ>

Повне найменування юридичної особи: Львівський національний університет імені Івана Франка

Код за ЄДРПОУ: 02070987

Місцезнаходження: вул. Університетська, буд. 1, Львів, 79000, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

VIII. **Заключні відомості**

**Власне Прізвище Ім'я По-батькові
голови ради**

Лучечко Андрій Петрович

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

Лучечко Андрій Петрович

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Жак Ольга Володимирівна

Реєстратор

УкрІНТЕІ

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



Юрченко Тетяна Анатоліївна