

ВИСНОВОК

про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертації «Оптико-електронні параметри кристалів фторберилату амонію» здобувача ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали» Горона Богдана Ігоровича

1. Актуальність теми дисертації

Прогрес науки суттєво залежить від прогресу технологій та засобів вимірювань, що спонукає до інтенсивних досліджень в цій галузі. Важливим напрямком вирішення завдань сучасної прикладної фізики та матеріалознавства є пошук та дослідження матеріалів, які володіють високими механічною міцністю, термічною стійкістю, оптичною пропускнуою здатністю, кращими технологічними та експлуатаційними параметрами, а також дешевизною отримання. Значний пласт у матеріалознавстві займають діелектричні кристали. Вони є одними з важливих конструкційних матеріалів у сучасній техніці, які широко використовують в оптоелектроніці, фотоніці, кристалооптичній сенсоріці, а також для акустооптичної модуляції ультрафіолетового випромінювання. Важливим є завдання зменшення неточності вимірювань під час використання таких сенсорів, що, через їх технологічні удосконалення, є дуже складним процесом. Тому, досить часто, для покращення точності датчиків використовують додаткове індивідуальне калібрування та штучний інтелект. Однак проблеми нестабільності сенсорів, зумовлені впливом різних агресивних середовищ, не завжди можуть бути вирішені цими засобами. Проблеми розробки нових датчиків та матеріалів для сенсорів стають дуже актуальними. На сьогодні зростає потреба розробок точніших чутливих елементів, оскільки точність вимірювання має значний вплив на економічні, екологічні та медичні сфери.

Кристали фторберилату амонію $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ (ФБА) є одними з класичних представників діелектричних кристалів групи A_2BX_4 . Фізичні параметри цих сполук можна ефективно змінювати під дією катіонного заміщення в аніонній підґратці. З'ясування впливу ізовалентного катіонного заміщення у межах аніонної підґратки дає можливість розробити фізико-технологічні основи виготовлення ефективних та надійних твердотільних елементів для відновлювальної енергетики (сонячні та вітрові електростанції). Отримані нові відомості про явища та процеси в таких сполуках, безперечно, стануть основою для подальших досліджень у цій галузі та будуть орієнтиром для світових і вітчизняних вчених.

Тему дисертації затверджено на засіданні Вченої ради Львівського національного університету імені Івана Франка, протокол № 90/11 від 26.11.2020 р.

2. Зв'язок теми дисертації з державними програмами, науковими напрямами університету та кафедри

Дисертаційну роботу виконано згідно з основним напрямом досліджень кафедри загальної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка. Автор брав участь у науково-дослідній роботі держбюджетної теми: «Трансформація оптико-електронних параметрів і структура нових кристалічних матеріалів для сенсорної техніки та оптоелектроніки» (№ д.р. 0120U102320) (2020–2023 рр.); гранту Національного фонду досліджень України 2020.02/0211 «Експериментально-теоретичне вивчення і прогнозування фотопружних властивостей кристалічних матеріалів для пристроїв керування електромагнітним випромінюванням» (підтримка досліджень відомих і молодих вчених) (2020–2023 рр.); «Нові широкозонні матеріали для детектування та керування електромагнітним випромінюванням у пристроях подвійного призначення» ((№ д.р. 0124U001228) (з 2024 р.).

3. Особистий внесок здобувача в отриманні наукових результатів

Дисертація є самостійною науковою працею, в якій висвітлені власні думки та розробки автора, що дозволили вирішити поставлені задачі. Зокрема, дисертантом було синтезовано кристали фторберилату амонію, проведено вимірювання впливу одновісних тисків на ІЧ-спектри кристалів ФБА, за допомогою спеціального програмного забезпечення розраховано його зонну-енергетичну структуру та спектри діелектричної проникності в різних фазах. Він брав активну участь у інтерпретації отриманих результатів, написанні наукових робіт, доповідях на семінарах та конференціях. Автор проводив аналіз результатів нелінійної апроксимації даних щодо діелектричної проникності в області фазового переходу з несумірної в сегнетоелектричну фазу, з'ясував, що найкраще отримані дані описує модель Леванюка–Саннікова, також працював над тим, щоб висловити припущення, чому отримано саме такий результат.

Результати досліджень, наведені у дисертаційній роботі та опубліковані у наукових статтях, належать авторові і є його науковим доробком.

4. Достовірність та обґрунтованість отриманих результатів та запропонованих автором вирішень, висновків, рекомендацій

Достовірність та обґрунтованість отриманих в роботі результатів підтверджується апробацією даних на численних міжнародних наукових

конференціях та семінарах, а також публікаціями в престижних міжнародних фахових виданнях. Обґрунтованість запропонованих в роботі вирішень забезпечена використанням новітнього програмного забезпечення, що реалізує сучасні підходи до теоретичного дослідження кристалів, які широко використовуються дослідниками у всьому світі. Для підтвердження адекватності результатів комп'ютерного моделювання та обчислень, у дисертаційній роботі наведено відповідні експериментальні дані, що були отримані провідними науковцями світу.

5. Ступінь новизни основних результатів дисертації порівняно з відомими дослідженнями аналогічного характеру

Під час виконання дисертаційної роботи вперше:

1. Досліджено діелектричні властивості кристалів ФБА в параелектричній, несумірно модульованій та і сумірній сегнетоелектричній фазах. Експериментальні результати для несумірної фази кристала ФБА розглянуто в рамках чотирьох феноменологічних теорій.
2. Розраховано зонну структуру за допомогою теорії функціоналу густини для параелектричної та сегнетоелектричної фаз, а також густини станів та парціальні густини станів. З'ясовано, що ширина забороненої зони в параелектричній фазі становить 6.39 еВ, а в сегнетоелектричній фазі — 6.79 еВ. В обох фазах вершина зони валентності та дно зони провідності знаходяться в центрі зони Брілюена, що вказує на те, що кристал фторберилату амонію — прямозонний діелектрик.
3. Досліджено температурні залежності показників заломлення та двопронезаломлення в широкому діапазоні температур та підтверджено існування ізотропних точок за температур 87 К та 312 К: зникнення анізотропії вздовж кристалографічних напрямків X та Z .
4. Визначено температурну область навколо фазового переходу T_i , де критичні флуктуації малі та застосовна класична теорія середнього поля.
5. Теоретично розраховано коефіцієнти пружності C_{ij} , матриця пружної податливості, модуль Юнга E , коефіцієнти Пуассона ν , а також полікристалічні об'ємні модулі B і модулі зсуву G кристала ФБА. Побудовані тривимірні поверхні просторового розподілу модуля Юнга E та об'ємного модуля B .
6. Досліджено ІЧ-спектри відбивання механічно вільного та одновісно затиснутого кристала ФБА для трьох поляризацій світла в широкому спектральному діапазоні 500...4000 cm^{-1} .

6. Перелік наукових праць, які відображають основні результати дисертації

6.1. Статті у наукових фахових виданнях України:

1. Горон Б., Рудиш М., Стадник В., Брезвін Р., Щепанський П., Матвіїшин І. Вплив одновісного стискання на інфрачервоні спектри кристала $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$. Вісник Львівського університету. Серія фізична. 2022. Вип. 59. с. 53–60. *(Особистий внесок здобувача: вирощування та кристалофізична орієнтація кристалів, проведення вимірювання спектрів відбивання в ІЧ ділянці спектру, формування основних положень та висновків).*
2. Мицик Б., Горон Б., Дем'янишин Н., Стадник В., Щепанський П., Кость Я. Пружнооптичні властивості кристалів фторберилату амонію. Вісник Львівського університету. Серія фізична. 2023. Вип. 60. с. 90–100. *(Особистий внесок здобувача: вирощування та кристалофізична орієнтація кристалів, проведення вимірювання впливу одновісного навантаження на двопротенезаломлюючі властивості кристалів, формування основних положень та висновків).*

6.2. Публікації у наукових періодичних виданнях, що проіндексовані в наукометричних базах Scopus та/або Web of Science:

1. Rudsyh M., Fedorchuk A., Stadnyk V., Shchepanskyi P., Brezvin R., Horon B., Khyzun O., Gorina O. Structure, electronic, optical and elastic properties of $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ crystal in paraelectric phase. Current Applied Physics. 2023. Vol. 45. – 76–85. *(Особистий внесок здобувача: Моделювання та теоретичний розрахунок енергетичних параметрів досліджуваного кристала в парелектричній фазі, участь у формуванні основних положень та висновків).*
2. Horon B., Kushnir O., Stadnyk V., Shchepanskyi P. Temperature dependence of dielectric permittivity in incommensurately modulated phase of ammonium fluoroberyllate. Condensed Matter Physics. 2022. Vol. 25(4) – 43704. *(Особистий внесок здобувача: проведення вимірювання температурної залежності діелектричної проникності кристалів ФБА, моделювання та теоретичний аналіз в рамках існуючих феноменологічних моделей поведінки діелектричної проникності в ділянці фазових переходів, участь у формуванні основних положень та висновків).*
3. Horon B., Kushnir O., Stadnyk V. Temperature dependences of refractive indices and optical birefringence in ammonium fluoroberyllate. Ukr. J. Phys. Opt. 2024. Vol. 25. – 01020. *(Особистий внесок здобувача: вирощування та кристалофізична орієнтація кристалів, проведення вимірювання температурних залежностей показників заломлення, теоретичні розрахунки та комп'ютерне моделювання критичних індексів досліджуваного кристала, участь у формулюванні основних положень та висновків).*

4. Girnyk I., Horon B., Kapustianyk V., Kushnir O., Shopa R. Nonlinear background correlations to dielectric permittivity of ferroics and multiferroics. *Condensed Matter Physics*. 2023. Vol. 26(4). — 43604. (*Особистий внесок здобувача: проведення аналізу температурної поведінки кристалів фторберилату амонію та порівняння з температурною поведінкою інших кристалів, наведених у статті, участь у формулюванні основних положень та висновків*).

6.3. Публікації у виданнях (матеріалах конференцій), що проіндексовані в наукометричних базах Scopus та/або Web of Science:

1. Horon B., Kushnir O., Stadnyk V., Kashuba A. Least-squares analysis of the dielectric permittivity for improper ferroelectric ammonium fluoroberyllate. 12th IEEE International Conference on Electronic and Informational Technologies, Lviv, 2021. pp. 261–264.

2. 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. 12th IEEE International Conference on Electronic and Informational Technologies, Lviv, 2021. pp. 310–314.

7. Апробація основних результатів дослідження на конференціях, симпозіумах, семінарах тощо

1. Rudysh M., Fedorchuk A., Stadnyk V., Shchepanskyi P., Brezvin R., Horon B., Lupanov A. Structure and properties calculation of $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ crystals. Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики «Еврика-2021», Львів, 2021. (*усна доповідь*)

2. Horon B., Kushnir O., Stadnyk V. Comparison of Levanyuk–Sannikov and Prelovsek–Levstik–Filipic models for incommensurate–ferroelectric phase transition in ammonium fluoroberyllate. XI International Seminar «Properties of ferroelectric and superionic systems», Uzhhorod, 2022. (*усна доповідь*)

3. Horon B., Stadnyk V., Kushnir O. 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. (*усна доповідь*)

4. 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 «Еврика-2022», Львів, 2021. (усна доповідь)

5. Horon B., Kushnir O., Stadnyk V. Measurements of optical anisotropy of ferroelectric fluoroberyllate crystals. XII International Seminar «Properties of ferroelectric and superionic systems», Uzhhorod, 2021. (стендова доповідь)

8. Наукове значення виконаного дослідження із зазначенням можливих наукових галузей та розділів програм навчальних курсів, де можуть бути застосовані отримані результати

У роботі розраховано зонну структуру за допомогою теорії функціоналу густини для високотемпературної параелектричної та низькотемпературної сегнетоелектричної фаз, а також густина станів та парціальні густини станів. З'ясовано, що ширина забороненої зони в параелектричній фазі становить 6.39 eV, а в сегнетоелектричній фазі — 6.79 eV. Розраховані дійсна та уявна складові діелектричної проникності, для параелектричної фази, спектральна поведінка показника заломлення, заряди Мілікена та заселеності зв'язків, еластичні властивості. Уперше виміряно спектральну залежність дзеркального відбивання ФБА у широкому інфрачервоному діапазоні (від 700 до 3000 cm^{-1}) для механічно вільного кристалу, а також для одновісно затиснутого кристалу. Проведено нелінійну апроксимацію діелектричної проникності кристалів ФБА відомими моделями (закон К'юрі–Вейса, узагальнений закон К'юрі–Вейса, модель Леванюка–Саннікова, модель Преловшека–Левстіка–Філіпіча).

Результати виконаного дослідження можуть бути використані у навчальних курсах для підготовки фахівців спеціальностей 104 «Фізика та астрономія» і 105 «Прикладна фізика та наноматеріали», зокрема, при вивченні дисциплін «Моделювання фізичних властивостей матеріалів», «Фазові переходи в кристалічних системах», «Сучасні проблеми фізики реальних кристалів», «Комп'ютерне моделювання фізичних процесів».

9. Практична цінність результатів дослідження із зазначенням конкретного підприємства або галузі, де вони можуть бути застосовані

Отримані відомості про температурні залежності показників заломлення та двоприменезаломлення в широкому діапазоні температур, які підтверджують існування ізотропних точок є необхідним інструментом для прогнозування нових матеріалів з наперед заданими властивостями. Отримані результати щодо температурних залежностей приростів двоприменезаломлення, а також визначених за допомогою інтерферометричного методу усіх компонент тензора

абсолютних п'єзооптичних констант і фотопружних коефіцієнтів кристалів фторберилату амонію дають підстави вважати ці кристали одними з найкращих фотопружних матеріалів. Теоретично розраховані значення пружних констант та експериментально визначене значення акустооптичної ефективності та фотопружних коефіцієнтів дозволяють запропонувати ці кристали як активні елементи в акустооптичних модуляторах світла, а також кристалооптичних сенсорах температури та тиску.

10. Оцінка структури дисертації, її мови та стилю викладення

Дисертація за структурою, мовою та стилем викладення відповідає вимогам МОН України.

Дисертацію заслухано та обговорено на фаховому семінарі кафедри загальної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка (протокол № 7 від 30.01. 2024 р).

У ході обговорення дисертації суттєвих зауважень, які стосуються суті роботи, не було висунуто.

В цілому дисертаційна робота Горона Богдана Ігоровича «Оптико-електронні параметри кристалів фторберилату амонію» є завершеною науковою працею в межах поставлених завдань, у якій розв'язана наукова проблема щодо встановлення енергетичної структури кристалів фторберилату амонію, з'ясуванню впливу фазових переходів параелектрична–несумірна–сегнетоелектрична фази на структуру валентної та зони провідності, а також поведінку рефрактивних та діелектричних параметрів.

Основні результати наукового дослідження відображено у 8 наукових статтях, з них 2 опубліковано у наукових фахових виданнях України та 6 — в українських і закордонних (Нідерланди) наукових виданнях, що проіндексовані у наукометричних базах Scopus та/або Web of Science.

На основі вищесказаного можна зробити такі висновки щодо поданої дисертаційної роботи:

1. За актуальністю обраної теми, обсягом, достовірністю та рівнем апробації отриманих результатів, науковою новизною, обґрунтованістю висновків, практичною цінністю дисертаційна робота «Оптико-електронні параметри кристалів фторберилату амонію» відповідає вимогам наказу МОН України № 40 від 12.01.2017 р. «Про затвердження Вимог до оформлення дисертації» та п. 6 «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про


присудження доктора філософії», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 року №44 (із змінами від 21.03.2022 року № 341 та від 19.05.2023 року № 502).

2. Дисертація відповідає спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали (галузь знань 10 «Природничі науки»).

3. Наукові праці Горона Б.І., опубліковані за результатами дисертаційної роботи, за кількістю та якістю відповідають п.п. 8-9 «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження доктора філософії», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 року № 44 (із змінами від 21.03.2022 року № 341 та від 19.05.2023 року № 502).

4. Дисертація «Оптико-електронні параметри кристалів фторберилату амонію» Горона Богдана Ігоровича рекомендується для подання до розгляду та захисту у спеціалізованій вченій раді.

Головуючий на засіданні фахового семінару,
професор кафедри загальної фізики,
д-р фіз.-мат. наук, професор


Тарас ДЕМКІВ

20.02.2024 року

Підпис проф. Тараса ДЕМКІВА засвідчую.

Вчений секретар
Львівського національного
університету імені Івана Франка,
доц.




Ольга ГРАБОВЕЦЬКА