

До спеціалізованої вченої ради ДФ 35.051.167
Львівського національного університету
імені Івана Франка
79000, м. Львів, вул. Університетська, 1

ВІДГУК

**офіційного опонента, доктора фізико-математичних наук, професора,
декана факультету фізики, математики, економіки та інноваційних
технологій Дрогобицького державного педагогічного університету
імені Івана Франка Столярчука Ігоря Дмитровича на дисертаційну роботу
Горона Богдана Ігоровича на тему «Оптико-електронні параметри кристалів
фторберилату амонію», представлену на здобуття ступеня доктора філософії
з галузі знань 10 Природничі науки
за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали**

Актуальність теми дослідження та її зв'язок з науковими програмами, планами, темами. Важливим напрямком вирішення завдань сучасної прикладної фізики та матеріалознавства є пошук та дослідження матеріалів, фізичні властивості яких вирізняються своєю унікальністю, проявом конкурентних механізмів протікання електронних процесів та перспективністю практичного використання. В останнє десятиліття значно зросла увага дослідників до діелектричних кристалів, зокрема щодо використання їх для створення нових технологій і методів вимірювання, дослідження процесів передавання, зберігання, оброблення та відтворення інформації. Це, безсумнівно, зумовлює актуальність дисертаційної роботи Б. І. Горона, яка присвячена з'ясуванню природи змін оптико-електронних параметрів, експериментально визначених та теоретично розрахованих, кристалів фторберилату амонію в області фазових переходів з параелектричної в неспівмірну та з неспівмірної в сегнетоелектричну фази.

Результати дисертаційної роботи спрямовано на вирішення важливої соціальної, економічної, технологічної та наукової проблеми, що підтверджується відповідністю розпорядження Кабінету Міністрів України від 23 лютого 2022 р. № 223-р: «Матеріали нового покоління та вироби з них:

Технології створення нових речовин та матеріалів із спеціальними властивостями», а також відповідає пріоритетним напрямам наукових досліджень відповідно до Закону України «Про пріоритетні напрями розвитку науки і техніки» – стаття 3 «Пріоритетні напрями розвитку науки і техніки на період до 2023 року», пункт 2 «фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави» та пункт 7 «нові речовини і матеріали»; пріоритетним тематичним напрямом наукових досліджень згідно з постановою Кабінету Міністрів України від 7 вересня 2011 р. № 942 «Про затвердження переліку пріоритетних тематичних напрямів наукових досліджень і науково-технічних розробок на період до 2023 року», а саме, 1. Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України у світі та сталого розвитку суспільства і держави; 1.3 Фундаментальні проблеми фізики, астрофізики, матеріалознавства, атомної енергетики та радіаційної безпеки; 7. Нові речовини і матеріали; 7.5. Оптичні, радіопрозорі, електричні, магнітні, напів- та надпровідні, низьковимірні і розумні матеріали та системи і прилади на їх основі.

Дисертаційну роботу виконано на кафедрі загальної фізики фізичного факультету Львівського національного університету імені Івана Франка у рамках виконання держбюджетної теми № 0120U102320 «Трансформація оптико-електронних параметрів і структура нових кристалічних матеріалів для сенсорної техніки та оптоелектроніки» (2020–2022 рр.) і 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 та молодих вчених) (2020–2023 рр.).

Під час виконання дисертаційного дослідження було використано матеріально-технічну базу кафедр експериментальної фізики і загальної фізики Львівського національного університету імені Івана Франка.

Обґрунтованість і достовірність наукових положень, висновків і рекомендацій дисертації. Наукові результати та висновки, викладені в роботі

Б. І. Горона, є обґрунтованими та достовірними. Це забезпечено поєднанням теоретичних методів досліджень із експериментальними, такими як метод Сенармона, метод Обреїмова, спектрофотометричне вимірювання спектрів дзеркального відбивання, методу Маха–Цендера, метод ємнісного вимірювання діелектричної проникності, квантово-хімічні розрахунки електронної структури методом теорії функціонала густини за допомогою наближення узагальнений градієнтів, ультрам'яких псевдопотенціалів тощо. Такий комплексний підхід дозволив отримати принципово нові дані, здійснити дослідження оптичних властивостей кристалів фторберилату амонію в широкому діапазоні температур і в області фазових переходів, з'ясувати походження енергетичних зон в параелектричній та сегнетоелектричній фазах, дослідити діелектричну поведінку кристалів фторберилату амонію в неспівмірній фазі, вплив одноісних тисків на ІЧ-спектри кристалів та надати їм науково обґрунтовану інтерпретацію.

Наукова новизна. Серед найважливіших наукових результатів, отриманих автором при виконанні дисертаційної роботи, слід відзначити наступні:

- У параелектричній, неспівмірно модульованій і співмірній сегнетоелектричній фазах досліджено діелектричні властивості кристалів фторберилату амонію. В рамках чотирьох феноменологічних теорій проаналізовано отримані експериментальні результати для неспівмірної фази синтезованих кристалів.

- У широкому температурному діапазоні проведено спектроскопічні дослідження показників заломлення та двоприменезаломлення кристалів фторберилату амонію.

- Уперше проведено теоретичний розрахунок зонно-енергетичної структури кристала $(\text{NH}_4)_2\text{BeF}_4$ у параелектричній і сегнетоелектричній фазах з використанням першопринципових розрахунків у рамках теорії функціоналу густини.

- Теоретично розраховано коефіцієнти пружності C_{ij} , матрицю пружної податливості, модуль Юнга E , коефіцієнти Пуассона ν , а також полікристалічні об'ємні модулі B і модулі зсуву G кристала фторберилату амонію. Побудовано тривимірні поверхні просторового розподілу модуля Юнга E та об'ємного

модуля B .

- У широкому спектральному діапазоні ($500\text{...}4000\text{ см}^{-1}$) для трьох поляризацій світла проведено дослідження інфрачервоних спектрів відбивання механічно вільного та одновісно затиснутого кристала фторберилату амонію.

Практичне значення отриманих результатів дисертаційної роботи полягає у тому, що на основі вивчення температурних характеристик оптичної індикатриси кристалів фторберилату амонію, встановлено температурні положення двох квазіізотропних точок, які практично не залежать від довжини світлової хвилі, що відкриває перспективи використання цього кристала як кристалооптичного датчика температури. Крім того, дослідження п'єзооптичних, пружнооптичних та акустооптичних властивостей кристалів фторберилату амонію показали, що ці кристали можна віднести до кращих акустооптичних матеріалів для ультрафіолетової області спектра.

Слід відзначити, що наукові результати, які розкривають основний зміст дисертації, висвітлено у 13 наукових працях, з них: 8 статей у наукових журналах, 6 з яких входять до наукометричних баз даних Web of Science і Scopus та 2 публікації у наукових фахових виданнях України, апробацію результатів дисертації проведено на конференціях різного рівня (5 тез доповідей у матеріалах українських та міжнародних наукових конференцій). Автор безпосередньо брав участь у проведенні досліджень, обробці наукових даних та підготовці матеріалів до опублікування.

Загальна характеристика дисертаційної роботи.

Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних джерел. Дисертація викладена на 165 сторінках, з яких 119 сторінок становлять основний текст дисертації та список цитованої літератури, що налічує 139 найменування на 16 сторінках. Розділи добре структуровані, в завершенні кожного розділу містяться висновки. Матеріал дисертації викладено логічно, послідовно. Робота добре проілюстрована, більшість рисунків виконано якісно.

У **вступі** дисертаційної роботи обґрунтовано актуальність, визначено мету, завдання, об'єкт, предмет та методи дослідження, наукову новизну, зв'язок дослідження з науковими програмами, наведено відомості про

особистий внесок здобувача та дані щодо публікацій та апробації одержаних наукових результатів.

Перший розділ присвячено літературному огляду, в якому наведено загальні відомості про кристали фторберилату амонію, його кристалічну структуру в різних фазах, а також розглянуто електронні, оптичні та механічні властивості.

Другий розділ містить опис методик експериментальних досліджень, а також методик теоретичних розрахунків, зокрема опис теорії функціоналу густини і методу оптимізації Бройдена–Флетчера–Голдфарба–Шанно.

Третій розділ дисертації присвячено розрахункам зонно-енергетичної структури кристалів фторберилату амонію в параелектричній та сегнетоелектричній фазах. За допомогою теорії функціонала густини розраховано зонні структури, повні та парціальні густини станів, спектри діелектричної функції для обох фаз. Для параелектричної фази, окрім того, розраховано спектральну поведінку показників заломлення, коефіцієнти пружності C_{ij} , матрицю пружної податливості, модуль Юнга E , коефіцієнти Пуассона ν , а також полікристалічні об'ємні модулі B і модулі зсуву G . Показано, що в обох фазах вершина валентної зони утворена $2p$ -станами фтору, а дно зони провідності — $2s$ -станами берилію. З розрахунку парціальних густин електронних станів визначено походження енергетичних зон у кристалі. Також в третьому розділі наведено температурні залежності показників заломлення та двоприменезаломлення кристалів фторберилату амонію. Серед іншого виявлено, що число Гінзбурга для кристалу становить $2.5 \cdot 10^{-3}$, що вказує на те, що теорія середнього поля застосовна поблизу фазового переходу з параелектричної в несумірну фазу лише на відстань до 0.5 К. Показано, що аномалія в температурній поведінці показників заломлення та двоприменезаломлення існує тільки при переході з параелектричної в несумірну фазу. В той час як при переході з несумірної в сегнетоелектричну фазу аномалії не зареєстровано. Підтверджено існування в кристалах фторберилату амонію двох ізотропних точок – однієї в сегнетоелектричній та однієї в параелектричній фазах.

У **четвертому** розділі проаналізовано температурну поведінку діелектричної проникності поблизу фазового переходу з несумірної в сегнетоелектричну фазу в рамках чотирьох феноменологічних моделей (К'юрі–Вейса, узагальненої К'юрі–Вейса, Леванюка–Саннікова та Преловшека–

Левстіка–Філіпіча). З'ясовано, що найкраще описує експериментальні дані модель Леванюка–Саннікова. Крім того в четвертому розділі описано результати досліджень впливу одновісного тиску на поведінку ІЧ-спектрів відбивання кристалу фторберилату амонію, а також вимірювання його п'єзооптичних властивостей. Виявлено значну зміну інтенсивностей і смуг, які відповідають за коливання тетраедра BeF_4 .

Наведені в кінці дисертаційної роботи висновки, були достатньою мірою обґрунтовані в попередніх розділах, в тому числі за рахунок високого ступеню узгодженості з власними експериментальними даними, а також з даними останніх публікацій дослідників світового рівня.

Основний текст дисертації повністю відповідає заявленій меті та завданню цієї роботи. Окремо варто відзначити високий рівень логічної зв'язаності пунктів дисертаційної роботи, а також повноту наведеної автором інформації, яка є цілком достатньою, щоб зрозуміти суть викладених в роботі ідей та результатів. Мова і стиль дисертаційного дослідження відповідають загальноприйнятим науковим стандартам, є грамотними та послідовними, підписи до рисунків та таблиць вичерпні, без двозначних трактувань. Текстових запозичень без посилань або інших порушень принципів академічної доброчесності у дисертації Горона Богдана Ігоровича на тему «Оптико-електронні параметри кристалів фторберилату амонію» не виявлено. За всіма формальними ознаками дана робота відповідає чинним вимогам Міністерства освіти і науки України до оформлення дисертацій та повністю відповідає паспорту спеціальності галузі знань 10 Природничі науки за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали.

Водночас робота Горона Богдана Ігоровича не позбавлена й окремих недоліків, серед яких можна виділити наступні:

1. У дисертаційній роботі при аналізі механічних параметрів досліджуваних монокристалічних та керамічних зразків було застосовано апроксимацію експериментальних даних (рис. 4.21, рис. 4.22, рис. 5.13 та рис. 5.14), але не вказано похибки апроксимації.
2. Другий методичний розділ можна було б скоротити, наприклад, методики отримання досліджуваних матеріалів та методики їх дослідження.
3. Варто було б скоротити кількість другорядних формул по тексту дисертації, наприклад, на стор. 58, 70, 71. Також у позначенні рис. 5.8 (стор. 135) —

замість скорочення мкм, наведено міжнародне скорочення μm .

4. Наведено неповний список використаних скорочень, навіть якщо скорочення у роботі зустрічаються 1–2 рази, для зручності було б доцільно їх занести у перелік умовних скорочень та позначень.

Однак, наведені зауваження не впливають на достовірність наукових висновків, не знижують високої оцінки роботи Горона Б.І., її наукового та практичного значення. У цілому дисертація є закінченим науковим дослідженням, основні результати роботи є новими, актуальними та науково обґрунтованими, а вказані зауваження не зменшують наукове значення отриманих дисертантом результатів і не знижують загальну позитивну оцінку цієї роботи.

Загальний висновок. Враховуючи вищесказане, можна зробити висновок, що дисертаційна робота Горона Богдана Ігоровича на тему «Оптико-електронні параметри кристалів фторберилату амонію», представлена на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали повністю відповідає вимогам Наказу Міністерства освіти і науки України «Про затвердження Вимог до оформлення дисертації» № 40 від 12.01.2017 р. (зі змінами та доповненнями) і вимогам Постанови КМУ від 12.01.2022 р. №44 «Порядок присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії» (із змінами, внесеними згідно з Постановами Кабінету Міністрів України № 341 від 21.03.2022 р. та № 502 від 19.05.2023 р.), а її автор – **Горон Богдан Ігорович** – заслуговує на присудження йому ступеня доктора філософії з галузі знань 10 Природничі науки зі спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали.

Офіційний опонент:

доктор фізико-математичних наук, професор,
декан факультету фізики, математики, економіки
та інноваційних технологій Дрогобицького державного
педагогічного університету імені Івана Франка

Ігор СТОЛЯРЧУК