

ПОВІДОМЛЕННЯ

про утворення разової спеціалізованої вченої ради

Заклад освіти/наукова
установа

Фізико - технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Веркіна
Національної академії наук України (ідентифікаційний код
03534601)

1. Здобувач ступеня доктора філософії

1.1. ПІБ здобувача ступеня
доктора філософії

Гамалій Володимир Олександрович

1.2. Освітньо-наукова
програма, яку завершив
здобувач

39026 Фізика (104 Фізика та астрономія)

1.3. Окремі елементи
освітньо-наукової програми
забезпечуються іншим
закладом вищої освіти/
науковою установою (у тому
числі іноземним)

ні

2. Дисертація

2.1. Тема дисертації

Низькотемпературне дослідження наноструктурованих поверхонь
модельного перовскіту титанату стронцію

2.2. Анотація дисертації

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальності 104 — «Фізика та астрономія» (10 — Природничі науки). — Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна Національної академії наук України, Харків, 2023 рік. Дисертаційну роботу присвячено низькотемпературним експериментальним дослідженням наноструктурованих поверхонь модельного перовскіту титанату стронцію в широкому інтервалі температур від кімнатної до температури рідкого гелію. Дослідження виконувались методом дифракції високоенергетичних електронів на відбиття (RHEED) з використанням гелієвого кріостату. У вступі наведено обґрунтування актуальності теми дисертаційної роботи як у фундаментальному, так і у прикладному аспектах. Наведено інформацію про наукові програми, в рамках яких дисертація виконувалась. Описано мету, завдання, об'єкт, предмет та методи дослідження, підкреслено наукову новизну та практичну цінність отриманих результатів. Зазначено особистий внесок здобувача, надано інформацію про апробацію результатів. Також наведено дані про структуру та обсяг дисертаційної роботи. У першому розділі «Структура та властивості перовскітів (огляд літератури)» наведено стислий літературний огляд загальних властивостей перовскітів, включаючи структурні особливості, сегнетоелектричність та фундаментальну і прикладну цінність даних матеріалів. Окрему увагу приділено властивостям складного оксиду титанату стронцію (STO), вивченню поверхонь якого присвячено дану роботу. Підкреслено важливість STO як модельної сполуки для досліджень в області фізики твердого тіла та фізики низьких температур. Зокрема детально розглянуто пограничну

конкуренцію між тенденцією цього об'єкту перейти у сегнетоелектричний стан при зниженні температури та роллю квантового нульового руху атомів, який запобігає такому переходу. Означено найважливіші елементи структури багатьох перовскітів, зокрема STO, такі, як центровані металом (Ti у випадку STO) кисневі октаедри та шари SrO, які відокремлюють кисневі октаедри один від одного. Такі октаедри відіграють ключову роль у динаміці кристалічної ґратки та структурних перетвореннях у таких та подібних об'єктах, наприклад, у надпровідниках, де саме такі структурні елементи, але у більш складній архітектурі, призводять до появи надпровідності. Тому не випадково, що саме STO часто використовується як підкладка для росту плівок надпровідників. У другому розділі «Методики експерименту та обробки даних» описано використану в даній роботі експериментальну установку для отримання знімків методом дифракції високоенергетичних електронів на відбиття (RHEED) у широкому інтервалі температур від кімнатної до температури рідкого гелію. Особливу увагу приділено виконанню вимог щодо можливості отримувати інформацію дійсно від чистих та гладких монокристалічних поверхонь. По-перше, описано процедуру приготування атомно гладких поверхонь STO та, по-друге, досить складні вимоги, які задовольняються, щоб зберегти ці поверхні у незабрудненому стані при низькотемпературних дослідженнях, коли зростає ймовірність конденсації остаточних газів.

Описано особливості різних режимів зйомки, зокрема оригінального підходу, розробленого у цій групі, що дає можливість отримати повну проекцію квазідвовимірної поверхневої ґратки у структурному експерименті.

У розділі детально описано методику обробки дифракційних зображень, принципово важливу для отримання прецизійних значень параметрів поверхневої кристалічної ґратки, яка дала змогу виявити та дослідити низку нових ефектів на поверхні STO. У розділі також представлено опис цікавих спостережень у різній геометрії зйомки, які вказують на досить високу електричну провідність поверхонь STO, який є взагалі ізолятором у об'ємі. Окремим підпунктом коротко описується використана в даній роботі теорія функціоналу густини (DFT) для розрахунків та моделювання окремих пластин титанату стронцію з різними варіантами виходу поверхні.

Третій розділ «Поверхневі структурні переходи» присвячено результатам досліджень атомарно гладких (001) поверхонь монокристалів STO за допомогою експериментів з дифракції високоенергетичних електронів на відбиття (RHEED), проведених в широкому діапазоні температур від 5,5 до 300 K. Знайдено відмінність поверхневих та об'ємних параметрів ґратки. Підкреслено принципову важливість порушення симетрії кристалічної ґратки на поверхні та вплив цього порушення на поверхневі значення параметрів ґратки.

Також описано ряд структурних аномалій, що вказують на фазові переходи та їх динаміку на поверхні титанату стронцію. Можливість спостерігати структурні перетворення на поверхні саме через виміри структурних параметрів пов'язана перш за все з тим, що у зоні структурного перетворення параметри ґратки аномально збільшуються відносно їх значень на зреласованій поверхні. У розділі описано знайдені залежності параметрів ґратки від глибини

у кристалі та суттєва специфічність цих залежностей для різних станів на поверхні, особливо при найнижчих температурах. Показано, що на зреласованій поверхні параметри ґратки збільшуються з глибиною у кристалі при достатньо низьких температурах, тоді як у зоні структурного перетворення залежності параметрів від глибини мають суттєво немонотонний характер, а саме збільшуються у першому поверхневому шарі, далі спадають у другому, а потім знову зростають з глибиною. Така специфічна поведінка може бути використана для встановлення стану поверхні.

Один із ключових результатів полягає в тому, що антиферодисторсійний фазовий перехід, що спостерігається в об'ємному STO при 105 K, розтягується на поверхні вздовж інтервалу температур від 70 до 120 K. Це свідчить з одного боку про те, що на поверхні відбуваються структурні перетворення, які корелюють з об'ємними фазовими змінами, а з другого вказують на те, що порушення симетрії на поверхні руйнують локалізацію фазового переходу при певній температурі. Виявлені аномалії при температурах нижче 7 K і навколо 35 K свідчать про взаємодію сегнетоелектричних зміщень атомів та їх квантово-механічної стабілізації через рух атомів у нульовій точці, внесок якого стає також важливим на поверхні. Окрім цього помічено, що існує аномальна поведінка поверхневого параметру близько 150 K та в температурному інтервалі 200-300 K, яка притаманна тільки поверхні та не спостерігається в об'ємному STO.

Четвертий розділ «Площинне стиснення на поверхні» присвячено дослідженню окремих параметрів ґратки в залежності від глибини у кристалі при низьких температурах та ефекту «площинного» стиснення кристалічної ґратки в перших поверхневих шарах. В діапазоні температур від 8 до 300 K було більш детально проаналізовано методом RHEED відмінність поверхневих параметрів у температурних інтервалах, де відбуваються структурні перетворення, від тих, які спостерігались поза такими температурними зонами. Особливістю цих перетворень, як відзначалось вище, є їх поширення на температурні інтервали (на відміну від об'ємних перетворень, які локалізовані при певній температурі). Температурні проміжки між інтервалами зі структурними перетвореннями визначають зони зреласованої ґратки, в яких були ідентифіковані та проаналізовані параметри рівноважної ґратки в залежності від номеру поверхневого шару. При низьких температурах виявлено значне «площинне» стиснення кристалічної ґратки у перших поверхневих шарах, що було експериментально підтверджено та теоретично обчислено за допомогою гібридних розрахунків DFT. Цікавий факт полягає в тому, що теплове розширення на поверхні виявилось значно вищим, ніж в об'ємі, призводячи до зближення параметрів на поверхні "в її площині" та об'ємної ґратки при кімнатній температурі, призводячи до поширеної думки, що на поверхні параметри ґратки паралельні поверхні та у об'ємі є однаковими. Наше дослідження показує, що це не так, і роз'яснює причини відмінностей параметрів "в площині" поверхні та об'ємної ґратки, а також їх температурні залежності.

У п'ятому розділі «Поверхневі наноструктури» розглядаються наноструктури на поверхні STO та деякі поверхневі особливості, пов'язані зі знайденою неспіврозмірністю між параметрами ґратки

в поверхневих шарах і об'ємними значеннями. Така неспіврозмірність виникає через порушення поверхневої симетрії та дефекти поверхні. Встановлено, що неспіврозмірність може релаксувати через ступінчасті краї та дислокації невідповідності, які можуть утворювати періодичні наноструктури на поверхні титанату стронцію.

Окрім цього було з'ясовано, що збільшення куту зрізу між реальною гладкою поверхнею та кристалографічними площинами (001) призводить до утворення періодичних терас на поверхні STO, що може бути цікавим в області створення контрольованих періодичних наноструктур з сегнетоелектричними властивостями. Додатково досліджено спеціальні впорядковані наноструктури у вигляді горбків на витравлених поверхнях, що відкривають нові можливості для застосувань, де є важливою організація та контроль нанорозмірної архітектури.

2.3. Ключові слова дисертації Фізика твердого тіла, низькі температури, кристалічна структура, складні оксиди, перовскіти, титанат стронцію, монокристали, сегнетоелектрики, надпровідники, наноструктури, структурний аналіз, дифракція на відбиття електронів високих енергій (RHEED), фазові переходи, поверхневі структурні переходи, теплове розширення, електрична провідність, дефекти структури, дислокації невідповідності, поверхнева неспіврозмірність, теорія функціоналу густини

2.4. Посилання, за яким розміщено текст дисертації http://ilt.kharkiv.ua/bvi/structure/theses/hamalii_thesis.zip

2.5. Публікації здобувача, зараховані для захисту

N.V. Krainyukova, V.O. Hamalii, A.V. Peschanskii, A.I. Popov, E.A. Kotomin, Low temperature structural transformations on the (001) surface of SrTiO₃ single crystals, Low Temperature Physics 46, 740 (2020), Q3

Рік	2020
Ключові слова	strontium titanate, surface structural transformations, reflection high-energy electron diffraction, Raman spectroscopy
DOI	10.1063/10.0001372
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1063/10.0001372

V.O. Hamalii, A.V. Peschanskii, A.I. Popov, N.V. Krainyukova, Intrinsic nanostructures on the (001) surface of strontium titanate at low temperatures, Low Temperature Physics 46, 1170 (2020), Q3

Рік	2020
Ключові слова	strontium titanate, surface nanostructures, surface incommensurability, reflection high-energy electron diffraction, Raman spectroscopy
DOI	10.1063/10.0002470
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову	ні

інформацію	
Посилання	https://doi.org/10.1063/10.0002470
N.V. Krainyukova, V.O. Hamalii, L.L. Rusevich, E.A. Kotomin, J. Maier, Effect of 'in-plane' contraction on the (001) surface of the model perovskite SrTiO ₃ , Applied Surface Science 615, 156297 (2023), Q1	
Рік	2023
Ключові слова	strontium titanate, perovskites, single crystal surfaces, reflection high energy electron diffraction, lattice parameters, density functional theory
DOI	10.1016/j.apsusc.2022.156297
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2022.156297

3. Захист

3.1. Посилання, за яким здійснюватиметься онлайн-трансляція захисту	http://ilt.kharkiv.ua/bvi/structure/report/df64175011_sovet_for_hamalii.shtml
---	---

4. Разова рада

4.1. Дата рішення Вченої ради про утворення разової ради	20.12.2023
--	------------

Голова разової ради

ПІБ	Долбин Олександр Вітольдovich
Місце роботи	Фізико - технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України
Посада	заступник директора з наукової роботи (Основне місце роботи)
Факультет або інший структурний підрозділ	Відділ теплових властивостей і структури твердих тіл та наносистем
Науковий ступінь	Доктор наук, 01.04.09 Фізика низьких температур
Дата отримання диплома доктора філософії (кандидата наук)	-
ORCID	0000-0001-8631-5051

Публікації за тематикою дисертації

A.V. Dolbin, M.V. Khlistuck, V.B. Eelson, V.G. Gavrilko, N.A. Vinnikov, R.M. Basnukaeva, V.A. Konstantinov, K.R. Luchinskii, Y. Nakazawa, Thermal expansion of organic superconductor α -(BEDT-TTF)₂ NH₄Hg(SCN)₄, Low Temperature Physics 45 (1), 128 (2019), Q3

Рік	2019
Ключові слова	thermal conductivity, organic superconductors, phase transitions, superconductivity, thermal effects, thermomechanical effects,

	intermolecular forces, charge fluctuations
DOI	10.1063/1.5082324
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1063/1.5082324

M.S. Barabashko, M. Drozd, D. Szewczyk, A. Jeżowski, M.I. Bagatskii, V.V. Sumarokov, A.V. Dolbin, S.N. Nesov, P.M. Korusenko, A.N. Ponomarev, V.G. Geidarov, V.L. Kuznetsov, S.I. Moseenkov, D.V. Sokolov, and D.A. Smirnov, Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures 29, 331 (2020), Q2

Рік	2020
Ключові слова	carbon nanotubes, MWCNTs, low-dimensional systems, differential scanning calorimetry, low temperatures, specific heat
DOI	10.1080/1536383X.2020.1819251
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1080/1536383X.2020.1819251

N.A. Vinnikov, A.V. Dolbin, M.V. Khlistyuck, Calorimetric, NEXAFS and XPS studies of MWCNTs with low defectiveness, Hydrogen sorption by nanostructures at low temperatures (Review article), Low Temperature Physics 49, 507 (2023), Q3

Рік	2023
Ключові слова	low temperatures, hydrogen sorption, fullerene, carbon nanotubes, graphene, silicon aerogel, MCM-41, quantum diffusion
DOI	10.1063/10.0017811
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1063/10.0017811

Рецензент

ПІБ	Константинов Вячеслав Александрович
Місце роботи	Фізико - технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України
Посада	головний науковий співробітник (Основне місце роботи)
Факультет або інший структурний підрозділ	Відділ теплових властивостей і структури твердих тіл та наносистем
Науковий ступінь	Доктор наук, 01.04.09 Фізика низьких температур
Дата отримання диплома доктора філософії (кандидата наук)	–
ORCID	0000-0001-7079-7746

Публікації за тематикою дисертації

V. A. Konstantinov, A. V. Karachevtseva, V. P. Revyakin, V. V. Sagan. The lower limit of thermal conductivity in multicomponent solutions of rare gas solids. *Low Temperature Physics* 45 (3), 282 (2019), Q3

Рік	2019
Ключові слова	thermal conductivity, rare gas solids, solid solutions,, crystallographic defects, crystallography, thermal effects, phase transitions, phonons, intermolecular forces
DOI	10.1063/1.5090041
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1063/1.5090041

V. A. Konstantinov, A.I. Krivchikov, A.V. Karachevtseva, V. V. Sagan. Thermal transport in dynamically disordered phases of molecular crystals: A thermo activation mechanism, *Solid State Communications*, 329, 114241 (2021), Q2

Рік	2021
Ключові слова	single crystals, thermal transport, molecular crystals, disordered state, dynamically orientationally disordered phases, phase transitions
DOI	10.1016/j.ssc.2021.114241
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1016/j.ssc.2021.114241

V.A. Konstantinov, A.I. Krivchikov, V.V. Sagan, and A.V. Karachevtseva, Hopping mechanism of heat transfer in cyclic hydrocarbons, *Low Temperature Physics* 49, 548 (2023), Q3

Рік	2023
Ключові слова	thermal conductivity, phase transitions, heat transfer, rotational spectra, organic compounds, phonon scattering, cyclic hydrocarbons
DOI	10.1063/10.0017816
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1063/10.0017816

Рецензент

ПІБ	Соловйов Андрій Львович
Місце роботи	Фізико - технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України
Посада	провідний науковий співробітник (Основне місце роботи)
Факультет або інший	Відділ транспортних властивостей провідних та надпровідних

структурний підрозділ	систем
Науковий ступінь	Доктор наук, 01.04.07 Фізика твердого тіла
Дата отримання диплома доктора філософії (кандидата наук)	-
ORCID	0000-0001-8858-1177

Публікації за тематикою дисертації

E. Hannachi, Y. Slimani, M.A. Almessiere, S.A. Alotaibi, L.V. Omelchenko, E.V. Petrenko, U. Kurbanov, F. Ben Azzouz, A.L. Solovjov, and A. Baykal, YBCO polycrystal co-added with BaTiO₃ and WO₃ nanoparticles: Fluctuation induced conductivity and pseudogap studies, *Current Applied Physics* 48, 70 (2023), Q2

Рік	2023
Ключові слова	superconductors, YBCO polycrystals, fluctuation induced conductivity, pseudogap, perovskites
DOI	10.1016/j.cap.2023.01.008
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1016/j.cap.2023.01.008

E.N. Sgourou, A. Daskalopulu, I. Goulatis, Y. Panayiotatos, A.L. Solovjov, R.V. Vovk A. Chroneos, Modelling the Defect Processes of Materials for Energy Applications, *Applied Sciences*, 12(19), 9872 (2022), Q2

Рік	2022
Ключові слова	crystal structure, defect engineering, quasirandom structures, electronic materials, solid oxide fuel cells, nuclear materials, complex oxides
DOI	10.3390/app12199872
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.3390/app12199872

N. Kuganathan, A.L. Solovjov, R.V. Vovk, A. Chroneos, Defects, diffusion and dopants in Li₈SnO₆, *Heliyon*, 7 (7), E07460 (1-6) (2021), Q1

Рік	2021
Ключові слова	intrinsic defects, diffusion, dopants, atomistic simulation, crystal structure, complex oxides, Li ₈ SnO ₆
DOI	10.1016/j.heliyon.2021.e07460
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2021.e07460

Офіційний опонент

ПІБ	Морозовська Ганна Миколаївна
Місце роботи	Інститут фізики Національної академії наук України
Посада	Провідний науковий співробітник (Основне місце роботи)
Факультет або інший структурний підрозділ	Аспірантура Інституту фізики
Науковий ступінь	Доктор наук, 01.04.07 Фізика твердого тіла
Дата отримання диплома доктора філософії (кандидата наук)	-
ORCID	0000-0002-8505-458X

Публікації за тематикою дисертації

Anna Morozovska, Eugene Eliseev, Venkatraman Gopalan and Long-Qing Chen. Landau-Ginzburg theory of charge density wave formation accompanying lattice and electronic long-range ordering. *Physical Review B* 107, 174104 (2023), Q1

Рік	2023
Ключові слова	charge density waves, phase transitions, Landau-Ginzburg-Devonshire theory, spatially modulated phases, high-temperature superconductors
DOI	10.1103/PhysRevB.107.174104
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1103/PhysRevB.107.174104

Kyle P. Kelley, Anna N. Morozovska, Eugene A. Eliseev, Yongtao Liu, Shelby S. Fields, Samantha T. Jaszewski, Takanori Mimura, Jon F. Ihlefeld, Sergei V. Kalinin. Ferroelectricity in Hafnia Controlled via Surface Electrochemical State. *Nature Materials* 22, 1144 (2023), Q1

Рік	2023
Ключові слова	binary oxides, hafnia, zirconia, structural instabilities, antiferroelectrics, non-local screening, surfaces, transitions, electrochemical controls, ultra-high vacuum piezoresponse force microscopy, ferroelectricity, electrochemical boundary conditions, structural instabilities
DOI	10.1038/s41563-023-01619-9
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1038/s41563-023-01619-9

Anna N. Morozovska, Maksym V. Strikha, Kyle P. Kelley, Sergei V. Kalinin, and Eugene A. Eliseev. Effective Landau-type model of a HfxZr1-xO2-graphene nanostructure, *Physical Review Applied* 20, 054007 (2023), Q1

Рік	2023
-----	------

Ключові слова	nanostructure, graphene, multilayer thin flms, transition metal oxides, Landau-Ginzburg-Devonshire model, conductivity, infuence of surface and grain boundaries, ferroelectrics, dielectric properties
DOI	10.1103/PhysRevApplied.20.054007
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1103/PhysRevApplied.20.054007

Офіційний опонент

ПІБ	Рохмістров Дмитро Володимирович
Місце роботи	Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Посада	Доцент (Основне місце роботи)
Факультет або інший структурний підрозділ	Фізичний факультет
Науковий ступінь	Кандидат наук, 01.04.07 Фізика твердого тіла
Дата отримання диплома доктора філософії (кандидата наук)	10.03.2010
ORCID	0000-0002-3650-5110

Публікації за тематикою дисертації

Z. Zyman, A. Goncharenko, and D. Rokhmistrov, Crystallization of tricalcium phosphates from a hydrolyzed carbonated calcium phosphate, *Journal of Crystal Growth* 583, 126544 (2022), Q2

Рік	2022
Ключові слова	phase transformation, hydrolysis, ion substitution, calcium phosphates, amorphous precursor, effective biomaterials, structural analysis
DOI	10.1016/j.jcrysgr.2022.126544
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1016/j.jcrysgr.2022.126544

Z. Zyman, M. Epple, A. Goncharenko, M. Tkachenko, D. Rokhmistrov, and D. Sofronov, Efect of thermal and densification processes on reaction and conventional sinterings of a hydrolyzed calcium phosphate phase, *Ceramics International* 48, 6716 (2022), Q1

Рік	2022
Ключові слова	calcium phosphates, biphasic ceramics, structural analysis, phase transitions, synthesis, hydrolysis, thermal processes, sintering
DOI	10.1016/j.ceramint.2021.11.222
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні

інформацію	
Посилання	https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2021.11.222
K. I. Sokol, D. V. Rokhmistrov. Feature of electric resistance dependence on temperature for hydroxyapatite. Low Temperature Physics 49 (4), 453 (2023), Q3	
Рік	2023
Ключові слова	crystal lattice, electrical conductivity, X-ray diffraction, infrared spectroscopy, mass spectrometry, hydroxyapatites, structure, phase composition, impurities
DOI	10.1063/10.0017587
Одноосібне авторство	ні
Містить державну таємницю / службову інформацію	ні
Посилання	https://doi.org/10.1063/10.0017587

Підтвердження

Я підтверджую, що:

- я належним чином уповноважений/а закладом освіти/науковою установою на подання цього повідомлення, і за потреби надам документ, який підтверджує ці повноваження
- усі відомості, викладені у цьому повідомленні, є достовірними

Документ підписаний електронним підписом

Калиненко Олександр Миколайович

27.12.2023