

РІШЕННЯ СПЕЦІАЛІЗОВАНОЇ ВЧЕНОЇ РАДИ ПРО ПРИСУДЖЕННЯ СТУПЕНЯ ДОКТОРА ФІЛОСОФІЇ

Спеціалізована вчена рада ДФ 64.175.011 Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б.І. Веркіна Національної академії наук України, м. Харків, прийняла рішення про присудження ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» на підставі прилюдного захисту дисертації «Низькотемпературне дослідження наноструктурованих поверхонь модельного перовскіту титанату стронцію» 20 лютого 2024 року.

Гамалій Володимир Олександрович, 1995 року народження, громадянин України, освіта вища: закінчив у 2019 році Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна та здобув ступінь магістра за спеціальністю «Фізика та астрономія».

Закінчив навчання в аспірантурі Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б.І. Веркіна Національної академії наук України 31 жовтня 2023 р. Успішно виконав освітньо-наукову програму підготовки доктора філософії за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

Дисертаційну роботу виконано у відділі теплових властивостей і структури твердих тіл та наносистем Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник відділу теплових властивостей і структури твердих тіл та наносистем Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України **Крайнюкова Ніна Василівна**.

Здобувач має 3 статті за темою дисертації у міжнародних виданнях, що входять до міжнародних наукометричних баз (Scopus, Web of Science), що належать до квартилю Q1 (1 стаття) та Q3 (2 статті) відповідно до класифікації SCImago Journal and Country Rank, 0 монографій:

1. 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). DOI: 10.1063/10.0001372 (Scopus, квартиль Q3)
2. **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** (2020) 1170-1177, DOI: 10.1063/10.0002470 (Scopus, квартиль Q3)

3. N.V. Krainyukova, V.O. Hamalii, L.L. Rusevich, E.A. Kotomin, J. Maier, Effect of 'in-plane' contraction on the (0 0 1) surface of the model perovskite SrTiO₃, Applied Surface Science, **615**, 156297 (2023). DOI: 10.1016/j.apsusc.2022.156297 (Scopus, квартиль Q1)

У дискусії взяли участь голова і всі члени спеціалізованої вченої ради:

1. Опонент **Морозовська Ганна Миколаївна**, доктор фізико-математичних наук, професор, провідний науковий співробітник відділу фізики магнітних явищ Інституту фізики Національної академії наук України надала позитивний відгук із зауваженнями:

1. Робота дуже вдало та детально проілюстрована, але на багатьох рисунках відсутні похибки виміряних величин та/або відхилення від середніх значень. Якщо вони є меншими за розмір символів, то це потрібно щоразу вказувати, або вказувати саму похибку. Також бажано пояснювати випадкову немонотонність (так званий «зоряний розкид») деяких з таких залежностей або похибкою, або іншими механізмами.

2. Аналіз поверхневих фазових переходів у титанаті стронцію так чи інакше вимагає аналізу наявності кореляцій між структурними властивостями, які детально проаналізовані в роботі, та електрофізичними (зокрема полярними та діелектричними) властивостями тонких приповерхневих шарів. У роботі можна було більше уваги приділити саме аналізу змін електрофізичних властивостей поблизу поверхні та їх кореляції зі зміною параметрів ґратки та спектральних характеристик досліджених зразків.

3. Обговорення механізмів поверхневої сегнетоелектрики у титанаті стронцію так чи інакше вимагає уявлення та оцінок внесків поверхневого п'єзоелектричного ефекту (через втрату центра інверсії та поверхні) та флексоелектричного ефекту (через наявність градієнту властивостей поблизу поверхні). Дивись, наприклад роботу [Interfacial Polarization and Pyroelectricity in Antiferrodistortive Structures Induced by a Flexoelectric Effect and Rotostriction. Phys.Rev.B. 85, 094107 (2012), <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.094107>] та розділ 5 монографії ["Strontium Titanate: Synthesis, Properties". Editors: Alexander Tkach and Paula Vilarinho (Nova Science Publishers, New York 2019), ISBN: 978-1-53615-438-2 (eBook) <https://novapublishers.com/shop/strontium-titanate-synthesis-properties-and-uses/>]. Ці механізми повинні впливати на виявлений в роботі «ефект площинного стиснення на поверхні з характерним немонотонним розповсюдженням у глибину кристалу».

Але ці зауваження ніяк не знижують загальну високу оцінку представленої дисертаційної праці. Всі вони є побажаннями на майбутнє.

2. Опонент **Рохмістров Дмитро Володимирович**, кандидат фізико-математичних наук, доцент, доцент кафедри фізики твердого тіла, фізичний факультет Харківського національного університету ім. В.Н. Каразіна надав позитивний відгук із наступними зауваженнями:

1. Деякі положення потребують уточнення. В роботі використовується термін "поверхнева ґратка". Проте кристалічна ґратка не має такого визначення. Краще використовувати термін "кристалічна ґратка поверхневого шару досліджуваного зразку". Крім того, в методах дослідження також застосовується поняття "кута експозиції". Але кут вимірюється у градусах або радіанах, а експозиція в секундах. Тому краще використовувати терміни "кут падіння, кут дифракції".

2. У науковій новизні отриманих результатів в пункті 4 вказано, що "...виявлено сильне «площинне» стиснення параметрів ґратки". Проте розглядаються тільки зміни параметрів ґратки. Для підтвердження цього факту необхідні додаткові данні, наприклад, міжплощинні відстані, значення мікронапруг, які є характеристиками певних кристалографічних площин.

3. Розділ 2 повинен містити інформацію про методику вимірювання температури та забезпечення вакууму упродовж проведення експериментів. Також необхідно визначитись з поняттям "прецизійні параметри ґратки" вказавши з якою точністю вони вимірювались. В цьому ж розділі не вистачає інформації про те, яким методом розраховувалась ширина дифракційних профілів для визначення розмірів областей когерентного розсіювання, а також необхідно надати відомості, як враховувалась інструментальна ширина профілів (який матеріал використовували у якості еталону).

4. В розділах дисертації 3-5 основна увага приділяється структурним змінам та трансформаціям, які пов'язуються з низкою факторів, перш за все переходом із сегнетоелектричного в параелектричний стан, а також переміщеннями атомів у кристалічній ґратці. Проте в дисертації нічого не сказано про вміст домішок у зразках, їхній склад, концентрацію, температурні інтервали стабільності. Добре відомо, що домішки, які присутні у кристалічній ґратці, можуть істотно впливати на значення параметрів та забезпечувати вказані зміни. Також на залежностях параметрів ґратки від температури та кута падіння електронного проміння на зразок у розділах 3-5 необхідно вказувати діапазони експериментальної похибки (error bar) параметрів ґратки.

Всі недоліки, зазначені вище, жодною мірою не применшують загальної високої оцінки роботи та носять характер рекомендацій для подальших досліджень.

3. Рецензент **Константинов Вячеслав Олександрович**, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, головний науковий

співробітник відділу теплових властивостей і структури твердих тіл та наносистем Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України надав позитивну рецензію із зауваженнями:

1. При обговоренні природи температурних аномалій на кривих теплового розширення висунуто декілька припущень, але остаточного висновку на користь якогось з них не зроблено.

2. Загалом роботу написано послідовно та логічно побудовано. Але трапляються друкарські помилки та синоніми, вжиті для тих самих понять, що ускладнює сприйняття матеріалу.

Але вказані недоліки не впливають на загальне позитивне враження від роботи і не применшують її загальні переваги.

4. Рецензент **Соловійов Андрій Львович**, доктор фізико-математичних, професор, провідний науковий співробітник відділу мікроконтактної спектроскопії Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України надав позитивну рецензію на роботу, із зауваженням:

На жаль у дисертації досліджувались лише геометричні параметри поверхневої ґратки і не розглядалися інтенсивності дифракції електронів на квазидвовимірній поверхневій ґратці, які могли б дати інформацію щодо значень параметрів ґратки у нормальному до поверхні напрямку та доповнили б загальну картину симетрії та параметрів кристалу на поверхні. Бажано провести такі дослідження у майбутньому.

Але це зауваження ніяк не впливає на загальну високу оцінку наукового рівня дисертації.

5. Голова ради **Долбин Олександр Вітольдович**, доктор фізико-математичних наук, професор, заступник директора з наукової роботи Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна Національної академії наук України дав позитивну оцінку роботі, без зауважень.

Загальна оцінка роботи і висновок. Дисертація Гамалія Володимира Олександровича на тему «Низькотемпературне дослідження наноструктурованих поверхонь модельного перовскіту титанату стронцію» є актуальним завершеним науковим дослідженням.

Дисертацію присвячено детальному дослідженню та аналізу структури та морфології поверхні модельного перовскіту титанату стронцію. У роботі проаналізовано фазові перетворення на поверхні та їх відмінності від переходів у об'ємі, а також досліджено поверхневі наноструктури, умови їх отримання та розглянуто численні потенційні застосування.

Застосування унікальної методики зйомки методом дифракції високоенергетичних електронів на відбиття з безперервною зміною кута експозиції дозволило вперше спостерігати декілька нових ефектів залежно від номера поверхневого шару в кристалі аж до третьої, а іноді і до четвертої площини від поверхні.

Було встановлено, що характер залежностей параметрів поверхневої ґратки a «в площині» поверхні від глибини у кристалі чітко корелює з поверхневими станами і може служити індикатором певних станів. У рівновазі зазвичай спостерігаються зростаючі залежності a від глибини у кристалі, тоді як в областях структурних перетворень залежності є суто спадними з глибиною, якщо відповідне структурне перетворення розповсюджується не лише на поверхню, але й на об'єм.

Зафіксовано п'ять поверхневих структурних переходів. Три з них корелюють з відомими даними для об'єму, а саме з аномально високим зростанням діелектричної проникності в об'ємі при низьких температурах, а також з антиферодисторсійним переходом при ~ 105 К. Але на відміну від об'єму ці переходи не є локалізованими по температурі, а поширюються на інтервал температур, який може сягати декількох десятків градусів, як у останньому випадку. Дві інші спостережувані аномалії пов'язуються лише з поверхневими шарами і раніше не спостерігалися.

В областях температур, вільних від структурних змін, спостерігаються значення параметрів ґратки, характерні для зреласованих ґраток. Встановлено окремі параметри ґратки a_1 , a_2 , a_3 у перших трьох поверхневих шарах залежно від температури. У перших двох шарах виявлено сильне «площинне» стиснення параметрів ґратки при низьких температурах, а у третьому поверхнева ґратка розширена, що співпадає з теоретичними розрахунками для зреласованої поверхні (001) титанату стронцію методом теорії функціоналу густини.

Розглянуто тип поверхневих наноструктур, що виникають завдяки неспіврозмірності поверхневої ґратки та об'єму. Було також створено та проаналізовано специфічні наноструктури у вигляді горбків на поверхні зі збереженням кристалографічної орієнтації, а також періодичні наноструктури, що виникають у вигляді ступенів на поверхнях з більшими кутами зрізу.

Результати досліджень, наведені у дисертаційній роботі та опубліковані у наукових статтях, належать автору. Робота виконана з дотриманням усіх вимог академічної доброчесності. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело. За кількістю і рівнем публікацій, апробацією на міжнародних конференціях дисертаційна робота відповідає вимогам «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішен-

ня разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії» №44 від 12.01.2022 р.

Рада вважає, що дисертація Гамалія Володимира Олександровича на тему «Низькотемпературне дослідження наноструктурованих поверхонь модельного перовскіту титанату стронцію», що подана на здобуття ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія» є завершеним самостійним науковим дослідженням, сукупність результатів якого розв'язує наукове завдання, що має істотне значення для галузі знань 10 «Природничі науки», а за актуальністю, науковою новизною і практичною цінністю відповідає вимогам чинного законодавства України, «Порядку підготовки здобувачів вищої освіти ступеня доктора філософії та доктора наук у закладах вищої освіти (наукових установах)» затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 23.03.2016 р. № 261 та «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 12.01.2022 р. № 44, а здобувач Гамалій Володимир Олександрович заслуговує присудження ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

Результати відкритого голосування:

«За» - 5 членів ради,

«Проти» - 0,

«Утримались» - 0.

На підставі результатів відкритого голосування разова спеціалізована вчена рада ДФ 64.175.011 присуджує Гамалію Володимир Олександровичу ступінь доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 104 «Фізика та астрономія».

Голова разової
спеціалізованої вченої ради,
доктор фіз.-мат. наук,
професор



Олександр ДОЛБИН

