Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0823U102056

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-12-2023

Статус: Наказ про видачу диплома

Реквізити наказу МОН / наказу закладу: Наказ №17-ОД від 08.03.2024

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гамалій Володимир Олександрович
2. Volodymyr Hamalii

Кваліфікація: 104

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-0372-8748

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань: природничі науки

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: 39026 Фізика (104 Фізика та астрономія)

Дата захисту: 20-02-2024

Спеціальність за освітою: фізика та астрономія

Місце роботи здобувача:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 64.175.011_ID_4429

Повне найменування юридичної особи: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 47, Харків, Харківський р-н., 61103, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 47, Харків, Харківський р-н., 61103, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.19.04, 29.19.15, 29.19.29

Тема дисертації:

1. Низькотемпературне дослідження наноструктурованих поверхонь модельного перовскіту титанату стронцію
2. Low-temperature study of nanostructured surfaces of model strontium titanate perovskite

Реферат:

1. Дисертаційну роботу присвячено низькотемпературним експериментальним дослідженням наноструктурованих поверхонь модельного перовскіту титанату стронцію SrTiO3 (STO) 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 та надано інформацію про апробацію

результатів. У першому розділі «Структура та властивості перовскітів (огляд літератури)» наведено літературний огляд загальних властивостей перовскітів, їх прикладну цінність, а також властивості та структура STO. 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. У другому розділі «Методика експерименту та обробки даних» описано використану в даній роботі експериментальну установку для отримання знімків методом RHEED та особливості різних режимів зйомки. Особливу увагу приділено виконанню вимог щодо можливості отримувати інформацію дійсно від чистих та гладких монокристалічних поверхонь STO. Також описано методику обробки отриманих зображень. Окремим підпунктом коротко описується використана в даній роботі теорія функціоналу густини (DFT) для розрахунків та моделювання окремих пластин STO з різними варіантами виходу поверхні. У розділі також представлено опис цікавих спостережень у різній геометрії зйомки, які вказують на досить високу електричну провідність поверхонь STO. Третій розділ «Поверхневі структурні переходи» присвячено результатам досліджень атомарно гладких (001) поверхонь монокристалів STO методом RHEED в 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 сумарний вплив означених ефектів на поверхневі значення параметра ґратки. Також описано ряд структурних аномалій, що вказують на фазові переходи та їх динаміку на поверхні STO. 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. Виявлені аномалії при температурах нижче 7 K і навколо 35 K свідчать про взаємодію сегнетоелектричних зміщень атомів та їх квантово-механічну стабілізацію 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 параметрів ґратки 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 в залежності від номеру поверхневого шару у температурних інтервалах, де відбуваються структурні перетворення, від тих, які спостерігались поза такими температурними зонами (коли ґратка є зрелаксованою). Особливістю цих перетворень є їх поширення на температурні інтервали. 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. Відмічено, що теплове розширення на поверхні виявилося значно вищим, ніж в об'ємі, призводячи до зближення параметрів поверхні "в її площині" та об'ємної ґратки при кімнатній температурі. У п'ятому розділі «Поверхневі наноструктури» висвітлюються 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. 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. Додатково досліджено спеціальні впорядковані наноструктури у вигляді горбків, які виникають на витравлених поверхнях.

2. The thesis presents the results of low-temperature experimental research of nanostructured surfaces of model strontium titanate perovskite SrTiO3 (STO) in a wide range of temperatures from room temperature to liquid helium temperature. Research was carried out by the reflection high-energy electron diffraction (RHEED) method using a helium cryostat. The introduction provides a rationale for the relevance of the topic of the dissertation in both fundamental and applied aspects. Information is provided about the scientific programs within which the dissertation was carried out. The goal, task, object, subject and research methods are described, the scientific novelty and practical value of the obtained results are emphasized. The personal contribution of the acquirer is

indicated, information about the approval of the results is provided. The first chapter "Structure and properties of perovskites " provides a concise literature review of the general properties of perovskites, their application value, and the STO properties and structure. In particular, the boundary competition between the tendency of this object to enter the ferroelectric state when the temperature decreases and the role of the quantum zero motion of atoms, which prevents such a transition, is considered. The second chapter, "Methodology of experiment and data processing", describes the experimental setup used in this work for obtaining pictures by the RHEED method and the features of different shooting modes. Particular attention is paid to the requirements for obtaining information from truly clean and smooth single-crystal STO surfaces. The method of processing the obtained images is also described. A separate subsection briefly describes the density functional theory (DFT) used in this paper for modeling of individual STO slabs with different surface terminations. The section also presents a description of interesting observations that indicate a rather high electrical conductivity of STO surfaces. The third chapter "Surface structural transitions" is devoted to the results of studies of atomically smooth (001) surfaces of STO single crystals in the temperature range from 5.5 to 300 K. Differences in surface and bulk parameters were found. The fundamental importance of breaking the symmetry of the crystal lattice on the surface and the combined effect of this breaking on the surface lattice parameter values are emphasized. A number of structural anomalies indicating phase transitions and their dynamics on the STO surface are also described. One of the key results is that the antiferrodistortion phase transition observed in bulk STO at 105 K extends on the surface along the temperature interval from 70 to 120 K. The detected anomalies at temperatures below 7 K and around 35 K indicate the interaction ferroelectric displacements of atoms and their quantum-mechanical stabilization due to the movement of atoms at the zero point, the contribution of which also becomes important on the surface. In addition, it was observed that there is an anomalous behavior of the surface parameter around 150 K and in the temperature range 200-300 K, which is characteristic only of the surface and is not observed in bulk STO. The fourth chapter "In-plane contraction on the surface" is devoted to the study of individual parameters and the effect of "in-plane" contraction of the crystal lattice in the first surface layers. In the temperature range from 8 to 300 K, the difference between the surface parameters depending on the number of the surface layer in the temperature ranges where structural transformations occur and those observed outside such temperature zones (when the lattice is relaxed) was analyzed in more detail by the RHEED method. A feature of these transformations is their spread over temperature intervals. At low temperatures, a significant "in-plane" contraction of the crystal lattice in the first surface layers was found, which was experimentally confirmed and theoretically calculated using hybrid DFT calculations. It was noted that the thermal expansion on the surface turned out to be significantly higher than in the volume, leading to convergence of the parameters of the surface "in its plane" and the bulk lattice at room temperature. The fifth chapter, "Surface nanostructures", highlights the nanostructures on the STO surface and some surface features related to the incommensurability between the lattice parameters in the surface layers and the bulk values. Such incommensurabilities occurs due to surface symmetry breaking and surface defects. It is found that the incommensurability can relax through step edges and mismatch dislocations. In addition, it was found that increasing the miscut angle between the real smooth surface and the (001) crystallographic planes leads to the formation of periodic terraces on the STO surface. Special ordered nanostructures like bumps that appear on etched surfaces have been invesigeted too.

Державний реєстраційний номер ДіР: 0117U002293, 0118U100347, 0122U001504, 0122U200489

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: 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

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:

- 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
- 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
- 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 SrTiO3, Applied Surface Science 615, 156297 (2023), Q1
- V. O. Hamalii, N. V. Krainyukova, "Structural transformations on the (001) surface of strontium titanate at low temperatures" in Book of Abstracts «Condensed Matter and Low Temperature Physics 2020», 2020, Kharkiv, Ukraine, p. 145.
- V. O. Hamalii, N. V. Krainyukova, "Nanostructures on the (001) surface of strontium titanate" in Book of Abstracts «II International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics», 2021, Kharkiv, Ukraine, p. 168
- V. O. Hamalii, N. V. Krainyukova, "In plane contraction on SrTiO3 (001) surface by the RHEED method" in Book of Abstracts «III International Advanced Study Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics», 2023, Kharkiv, Ukraine, p.155

Наукова (науково-технічна) продукція: матеріали

Соціально-економічна спрямованість: створення принципово нової продукції (матеріалів, технологій тощо) для забезпечення експортного потенціалу та заміщенню імпорту

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації: Впровадження не планується

Зв'язок з науковими темами: 0117U002293, 0118U100347, 0122U001504, 0122U200489

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Крайнюкова Ніна Василівна

2. Nina Krainyukova

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.09

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3997-1480

Додаткова інформація: Scopus Author Identifier 56634205600; Web of Science ResearcherID: Q-4785-2018

Повне найменування юридичної особи: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 47, Харків, Харківський р-н., 61103, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Рохмістров Дмитро Володимирович
2. Dmytro V. Rokhmistrov

Кваліфікація: к. ф.-м. н., доцент, 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-3650-5110

Додаткова інформація: Scopus Author Identifier: 14033413500; Web of Science ResearcherID: GCO-8999-2022

Повне найменування юридичної особи: Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

Код за ЄДРПОУ: 02071205

Місцезнаходження: майдан Свободи, буд. 4, Харків, Харківський р-н., 61022, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Морозовська Ганна Миколаївна
2. Hanna M. Morozovska

Кваліфікація: д. ф.-м. н., професор, 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-8505-458X

Додаткова інформація: Scopus Author Identifier 6602682668; Web of Science ResearcherID: W-8385-2018

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05147302

Місцезнаходження: 03028,Київ-28, пр.Науки,46, Київ, 03028, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Константинов Вячеслав Олександрович
2. Viacheslav O. Konstantynov

Кваліфікація: д. ф.-м. н., с.н.с., 01.04.09

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-7079-7746

Додаткова інформація: Scopus Author Identifier: 56273317700; Web of Science ResearcherID: FGI-8752-2022

Повне найменування юридичної особи: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 47, Харків, Харківський р-н., 61103, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Соловйов Андрій Львович
2. Andrii Solovjov

Кваліфікація: д.ф.-м.н., професор, 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0001-8858-1177

Додаткова інформація: Scopus Author Identifier: 6602101023; Web of Science ResearcherID: DXJ-8868-2022

Повне найменування юридичної особи: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, буд. 47, Харків, Харківський р-н., 61103, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Долбин Олександр Вітольдович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Долбин Олександр Вітольдович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Калиненко Олександр Миколайович
Реєстратор	УкрІНТЕІ

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

Юрченко Тетяна Анатоліївна