

Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0826U004808

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 24-08-2026

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:



II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Троцький Євгеній Миколайович

2. Yevhenii M. Trotskyi

Кваліфікація: 104

Ідентифікатор ORCID ID: 0009-0006-7044-7176

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: Фізика

Дата захисту: 09-10-2026

Спеціальність за освітою: 104 Фізика та астрономія

Місце роботи здобувача: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Веркіна
Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): PhD 16961

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

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, 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. Веркіна Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, 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: 29.37.03, 29.19.04, 29.19.07

Тема дисертації:

1. Особливості структурних переходів в низьковимірних органічних речовинах
2. Characteristics of structural transitions in low-dimensional organic materials

Реферат/анотація:

1. В дисертації виконано дослідження кристалографічних та динамічних характеристик низьковимірних органічних речовин під впливом електростатичної взаємодії з боку окремих атомів/молекул, введених у структуру речовини. Оригінальний текст дисертаційної роботи поділено на дві частини: 1) структурні переходи в органічних кристалах (біс)етилєн-дітіо-тетратіафульвалєна (BEDT-TTF) при допуванні меншими за розміром молекулами; 2) структурні переходи, які виникають при адсорбції молекул бензолу на моношарі графєну. Ці дві різні речовини характеризуються наявністю л-електронної взаємодії, яка відповідає за міжмолекулярну взаємодію всередині стопки BEDT-TTF, взаємодію цих молекул з допантами та за адсорбцію органічних молекул на графєні. У вступі коротко обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, визначено мету та основні завдання дослідження, об'єкт, предмет та методи дослідження. Наведено інформацію про структуру та обсяг дисертації. Розділ 1 присвячено огляду та аналізу літератури за темою

дисертації. В огляді розповідається про: 1) органічні провідники та надпровідники, отримані при хімічному з'єднанні з π -електронними донорними молекулами тетратіафульваленового (TTF) типу; 2) графен з адсорбованими на ньому органічними молекулами. Адсорбція також відбувається через π -електронну взаємодію. Розділ 2 присвячено дослідженню моделі квазіодновимірного ланцюжка з молекул BEDT-TTF. Дослідження починається з розгляду одновимірного ланцюжка, у який потім вбудовуються атоми/молекули, значно менші за розміром, ніж молекула BEDT-TTF. Далі представлено теоретичний опис структурних переходів в органічних молекулярних кристалах на основі BEDT-TTF під впливом малих молекул легуючої домішки. Вперше представлено квазіодновимірну модель, де молекули BEDT-TTF утворюють молекулярні стоси та взаємодіють переважно через сили Ван-дер-Ваальса, що описуються потенціалами типу Леннард-Джонса. Взаємодія малих молекул легуючої домішки з сусідніми молекулами BEDT-TTF представлена потенціалом подвійної ями, що дозволяє аналізувати поведінку переходу порядок-безлад, зникнення бар'єру та молекулярне зміщення в кристалічній ґратці. Після цього порівнюється поведінка системи при додаванні нейтральних та заряджених легуючих молекул. Нейтральні легуючі домішки можуть призвести до локального впорядкування, подвоєння періоду ґратки та утворення флуктуаційних доменів, які інтерпретуються за допомогою моделі, подібної до Ізінга. Заряджені легуючі домішки вводять електростатичні взаємодії, перенос заряду, утворення диполів та впорядкування зарядів на великі відстані. Ці ефекти можуть стабілізувати тривимірні впорядковані структури та створювати спонтанну поляризацію без зовнішнього електричного поля. У розділі 3 показано, що легування може змінювати рівноважну відстань, орієнтацію молекул та площу контакту між молекулами BEDT-TTF. Для пояснення переходу від паралельного вирівнювання молекул до структур з повернутими на певний кут молекулами використовується модифікований потенціал типу Жіріфалько, що включає сили ван дер Ваальса, квадрупольну та електростатичну взаємодії. Розділ 4 присвячено вивченню особливостей доменної структури молекул бензолу на моношарі графену. У цьому розділі досліджуються домени та доменні межі в квазідвовимірній системі ван дер Ваальса, утвореній молекулами бензолу, адсорбованими на графені. У дослідженні описується, як молекули бензолу зміщуються з симетричного нестабільного положення до стабільних місць адсорбції, утворюючи ліві та праві домени, пов'язані з двохатомною елементарною коміркою графену. Ці зміщення описані за допомогою векторного параметру порядку. Вперше введено класифікації цих доменів та ідентифікації можливих доменних меж з відносною орієнтацією 180° , 120° , 60° та 0° . Сформульовано топологічні правила відбору для визначення критеріїв існування конкретних типів доменних меж. У розділі також аналізуються геометричні властивості, де визначено ступінь заповнення та енергія різних конфігурацій меж. Введено класифікацію 180° доменних меж на вертикальні, де лінія межі ділить навпіл сторони графенових шестикутників, та горизонтальні, де діляться навпіл кути. Згідно отриманих результатів розрахунків, горизонтальні 180° межі мають найнижчу лінійну густину енергії потенціальної взаємодії і тому є найбільш стабільними. Ці доменні структури можуть впливати на електронні, механічні та динамічні властивості органічних гібридних матеріалів на основі графену. Досліджувані речовини широко використовуються в прикладних дослідженнях, які стосуються нано- та біоелектроніки.

2. The dissertation is devoted to the crystallographic and dynamic characteristics of the low-dimensional organic materials under the influence of electrostatic interactions from individual atoms/molecules introduced into the structure of the substance. The original text of the dissertation is divided into two parts: 1) structural transitions in organic crystals of (bis)ethylene-dithio-tetrathiafulvalene (BEDT-TTF) when doped with smaller molecules; 2) structural transitions that occur during the adsorption of benzene molecules on a graphene monolayer. These two different materials are characterized by the presence of π -electron interaction, which is responsible for the intermolecular interaction inside the BEDT-TTF stack, the interaction of these molecules with dopants, and the adsorption of organic molecules on graphene. The introduction briefly justifies the relevance of the topic of the dissertation, defines the goal and main objectives of the research, the object, subject, and methods of the research. Information about the structure and scope of the dissertation is provided. Section 1 is devoted to a review and analysis of the literature on the topic of the dissertation. The review discusses: 1) organic conductors and

superconductors obtained by chemical bonding with π -electron donor molecules of the tetrathiafulvalene (TTF) type; 2) graphene with organic molecules adsorbed on it. Adsorption also occurs through π -electron interaction. Section 2 is devoted to the study of a model of a quasi-one-dimensional chain of BEDT-TTF molecules. The study begins with a consideration of a one-dimensional chain, into which atoms/molecules that are much smaller in size than the BEDT-TTF molecule is then embedded. Next, a theoretical description of structural transitions in organic molecular crystals based on BEDT-TTF under the influence of small molecules of a doping impurity is presented. For the first time, a quasi-one-dimensional model is presented, where BEDT-TTF molecules form molecular stacks and interact mainly through van der Waals forces, described by Lennard-Jones type potentials. The interaction of small dopant molecules with neighboring BEDT-TTF molecules is represented by a double-well potential, which allows us to analyze the behavior of the order-disorder transition, the disappearance of the barrier, and molecular displacement in the crystal lattice. Then, the behavior of the system upon the addition of neutral and charged dopant molecules is compared. Neutral dopant impurities can lead to local ordering, doubling of the lattice period, and the formation of fluctuation domains, which are interpreted using an Ising-like model. Charged dopant impurities introduce electrostatic interactions, charge transfer, dipole formation, and long-range charge ordering. These effects can stabilize three-dimensional ordered structures and create spontaneous polarization without an external electric field. It is shown in section 3 that doping can change the equilibrium distance, molecular orientation, and contact area between BEDT-TTF molecules. A modified Girifalco-type potential, which includes van der Waals forces, quadrupole, and electrostatic interactions, is used to explain the transition from parallel molecular alignment to structures with molecules rotated at a certain angle. Section 4 is devoted to studying the features of the domain structure of benzene molecules on a graphene monolayer. This section investigates the domains and domain boundaries in a quasi-two-dimensional van der Waals system formed by benzene molecules adsorbed on graphene. The study describes how benzene molecules shift from a symmetrical unstable position to stable adsorption sites, forming left and right domains associated with the diatomic graphene unit cell. These displacements are described using a vector order parameter. For the first time, classifications of these domains and identification of possible domain boundaries with relative orientations of 180° , 120° , 60° and 0° are introduced. Topological selection rules are formulated to determine the criteria for the existence of specific types of domain boundaries. This section also analyzes geometric properties, where the filling degree and energy of different boundary configurations are determined. A classification of 180° domain boundaries is introduced into vertical, where the boundary line bisects the sides of graphene hexagons, and horizontal, where the corners are bisected. According to the obtained calculation results, horizontal 180° boundaries have the lowest linear potential interaction energy density and are therefore the most stable. These domain structures can affect the electronic, mechanical and dynamic properties of organic hybrid materials based on graphene. The studied materials are widely used in applied research related to nano- and bioelectronics.

Державний реєстраційний номер ДіР:

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:

- 1. V. A. Lykah, E. S. Syrkin, and E. N. Trotskii. "Heavy doped organic crystals ordering." Low Temperature Physics, 47, 5 406-411 (2021) Q3

- 2. E. M. Trotskii, E. S. Syrkin, V. O. Lykah, "Phase structures and interaction of BEDT-TTF molecules", Low Temperature Physics, 49, 5, 568-573 (2023) Q3
- 3. Yevhenii M. Trotskyi, Yevgen S. Syrkin, Victor O. Lykah, "Benzene on graphene: Types of domain boundaries", Low Temperature Physics, 52, 8, 1028-1034 (2026) Q3
- 4. Y. M. Trotskyi, Ye. S. Syrkin, V. O. Lykah, "Structural transitions of complex organic crystals BEDT-TTF", International Advanced Study Conference «Condensed Matter and Low Temperature Physics 2020», (CM<P 2020), June 8 – 14, 2020, Kharkiv, Ukraine.
- 5. Y. M. Trotskyi, Ye. S. Syrkin, V. O. Lykah, "Structural and phase transitions in BEDT-TTF", III International Conference "Condensed Matter and Low Temperature Physics", (CM<P 2023), June 5 – 11, 2023, Kharkiv, Ukraine.
- 6. Y. M. Trotskyi, Ye. S. Syrkin, V. O. Lykah, "BEDT-TTF molecular structural phases in dependence of doping molecule characteristics", 11th International Conference "Nanotechnologies and Nanomaterials NANO-2023", August 16 – 19, 2023, Bukovel, Ukraine.
- 7. Y. M. Trotskyi, Ye. S. Syrkin, V. O. Lykah, "Conditions for the formation of new structural phases in BEDT-TTF", IV International Conference "Condensed Matter 125 and Low Temperature Physics", (CM<P 2024), June 3 – 7, 2024, Kharkiv, Ukraine. Abstract: p. 188.
- 8. Y. M. Trotskyi, Ye. S. Syrkin, V. O. Lykah, "Domains and domain boundaries structure of benzene adsorbed on graphene", Bogolyubov Kyiv Conference "Problems of Theoretical and Mathematical Physics", September 24 – 26, 2024, Kyiv, Ukraine. Abstract: p. 50.
- 9. Y. M. Trotskyi, Ye. S. Syrkin, V. O. Lykah, "Dynamics and structure of quasi-2D hybrid materials", V International Conference "Condensed Matter and Low Temperature Physics", (CM<P 2025), June 2 – 6, 2025, Kharkiv, Ukraine. Abstract: p. 176.
- 10. Y. M. Trotskyi, Ye. S. Syrkin, V. O. Lykah, "Benzene on graphene surface: domains and domain boundaries", VI International Conference "Condensed Matter and Low Temperature Physics", (CM<P 2026), June 1 – 5, 2026, Kharkiv, Ukraine. Abstract: p. 178.

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: Планується до впровадження

Зв'язок з науковими темами: 0122U00150

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сиркін Євген Соломонович

2. Yevhen S. Syrkin

Кваліфікація: д.ф.-м.н., професор, 01.04.02, 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0009-0007-5330-8542

Додаткова інформація: SCOPUS ID 35609261100

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

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, 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. Бродський Роман Євгенійович

2. Roman Y. Brodskii

Кваліфікація: к. ф.-м. н., с.д., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-6231-9899

Додаткова інформація: SCOPUS ID 14053388100

Повне найменування юридичної особи: Інститут монокристалів Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 00210217

Місцезнаходження: проспект Науки, Харків, Харківський р-н., 61072, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Єзерська Олена Володимирівна

2. Elena Ezerskaya

Кваліфікація: к. ф.-м. н., доц., 01.04.11

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-6896-9550

Додаткова інформація: SCOPUS ID 6602585206

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

Код за ЄДРПОУ: 02071205

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Степаньян Степан Григорович

2. Stepan Stepanian

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.14

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-0899-0320

Додаткова інформація: SCOPUS ID 6701466705

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

Код за ЄДРПОУ: 03534601

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

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Гламазда Олександр Юрійович

2. Oleksandr Glamazda

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-3048-8732

Додаткова інформація: Scopus Author ID 6507904190; Web of Science Researcher ID AAD-5367-2020

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

Код за ЄДРПОУ: 03534601

Місцезнаходження: проспект Науки, 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

Шевченко Сергій Миколайович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові
головуючого на засіданні

Шевченко Сергій Миколайович

Відповідальний за підготовку
облікових документів

Калиненко Олександр Миколайович

Реєстратор

Юрченко Тетяна Анатоліївна

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**



Юрченко Тетяна Анатоліївна