Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0825U003795

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-09-2025

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Сухенко Ігор Віталійович
2. Sukhenko Ihor V.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 105

Назва наукової спеціальності: Прикладна фізика та наноматеріали

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: прикладна фізика та наноматеріали 51949

Дата захисту: 10-11-2025

Спеціальність за освітою: прикладна фізика та наноматеріали

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): PhD 10966

Повне найменування юридичної особи: Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: бульвар Академіка Вернадського, Київ, 03142, 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: Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: бульвар Академіка Вернадського, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації: Українська

Коди тематичних рубрик: 29.19.03, 29.19.04, 29.19.27, 29.19.29

Тема дисертації:

1. Електронна структура апатитів свинцю та кальцію, допованих перехідними металами та карбонат-іонами.
2. Electronic structure of lead and calcium apatites, doped with transition metals and carbonate ions.

Реферат:

1. Сухенко І. В. Електронна структура апатитів свинцю та кальцію, допованих перехідними металами та карбонат-іонами. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 — . — ІМФ НАНУ, Київ, 2025. Кристалохімічна універсальність і багатство функціональних властивостей апатитоподібних сполук, що мають загальну формулу Me10(XO4)6Y2, лежить в основі їх широкого застосування в матеріалознавстві та технологіях. У цій дисертації систематично досліджено структурні, електронні та магнітні властивості кількох класів апатитів, з особливим акцентом на докладний теоретичний і експериментальний аналіз ізоморфно-заміщених міддю свинцевих апатитів. Використовуючи методи теорії функціоналу густини (DFT), доповнені підходами DFT+U та параметрами U, J, отриманими з першопринципних розрахунків методом обмеженого наближення випадкової фази (cRPA), у роботі ідентифіковано перспективні кандидати з потенційно нетривіальною

електронною та магнітною поведінкою, що відкриває шлях до їх подальшого вивчення в області надпровідності, магнетизму та корельованих електронних явищ. В цілому, дисертація пропонує багаторівневе дослідження структури, електронних і магнітних властивостей апатитів, зокрема розглядаючи ефекти карбонатного заміщення, катіонне допування та особливо — міднозаміщені свинцеві апатити. Теоретичні обрахунки, підтримані експериментом, демонструють можливість суттєвої модифікації властивостей через цілеспрямовану хімічну заміну окремих атомів. Встановлення критеріїв стабільності, структурних викривлень, магнітної взаємодії та наявність пласких зон у мідновмісних апатитах підкреслює їхній потенціал для вивчення нових електронних фаз і створення функціональних матеріалів нового покоління.

2. Sukhenko I. V. Electronic structure of lead and calcium apatites, doped with transition metals and carbonate ions. -- Qualification scientific work in the form of manuscript. Thesis for doctor of philosophy degree in speciality 105 -- . -- IMP NASU, Kyiv, 2025. The crystal-chemical versatility and the wealth of functional properties of apatite-like compounds, represented by the general formula Me10(XO4)6Y2, underpin their broad applicability in materials science and technology. This dissertation systematically investigates the structural, electronic, and magnetic properties of several classes of apatites, with particular emphasis on a detailed theoretical and experimental analysis of copper-substituted lead apatites. Using density functional theory (DFT) methods, complemented by DFT+U and parameters U, J obtained from first-principles constrained random phase approximation (cRPA) calculations, the work identifies promising candidates with potentially nontrivial electronic and magnetic behavior, paving the way for their further exploration in superconductivity, magnetism, and correlated electronic phenomena. In summary, this dissertation presents a multiscale investigation of the structural, electronic, and magnetic properties of apatites, focusing on carbonate substitution, cation doping, and especially copper-substituted lead apatites. Theoretical calculations, supported by experiments, demonstrate the ability to engineer significant property changes through targeted atomic substitution. The identification of stability criteria, structural distortions, magnetic interactions, and flat-band features in copper-substituted apatites underscores their potential for exploring novel electronic phases and developing next-generation functional materials.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки: Нові речовини і матеріали

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності: Освоєння нових технологій транспортування енергії, впровадження енергоефективних, ресурсозберігаючих технологій, освоєння альтернативних джерел енергії

Підсумки дослідження: Нове вирішення актуального наукового завдання

Публікації:

- Sukhenko I. V., Karbivskyy V. L. Reflecting on the LK-99 fervour: insights and future prospects // Journal of Physics: Condensed Matter. 2024. Т. 37, № 8. С. 083002. (IOP Publishing) https://doi.org/10.1088/1361-648x/ad9804
- Karbivskyy V., Kurgan N., Hantusch M., Romansky A., Sukhenko I., Karbivska L. Design of the electronic structure and properties of calcium apatites via isomorphic modification of the cation sublattice, and prospects of their application // Journal of Applied Physics. 2024. Т. 135, № 6. С. 065102. (AIP Publishing) https://doi.org/10.1063/5.0179754
- Soroka A. P., Suhenko I. V., Kasianenko V. H., Karbivskii V. L., Karbivska L. I., Smolyak S. S. Electronic structure of calcium and cadmium arsenate apatites // Low Temperature Physics. 2025. Т. 51, № 3. С. 375–383. https://doi.org/10.1063/10.0035843
- Sukhenko, I. V., Karbivskyy, V. L., Kurgan, N. A., Nedilko, S. A., Ivanov, O. V., Kliuienko, L. P. (2025). Electronic structure of carbonate-containing lead and calcium apatites. Journal of Electron Spectroscopy and Related

Phenomena, 147563. https://doi.org/10.1016/j.elspec.2025.147563

Наукова (науково-технічна) продукція: матеріали; методи, теорії, гіпотези

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: 0122U002423 0123U100914 0124U003949

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Карбівський Володимир Леонідович
2. Volodymyr Karbivskyy

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-0412-2788

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: бульвар Академіка Вернадського, Київ, 03142, 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. Хижун Олег Юліанович
2. Oleh Y. Khyzhun

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-2403-8607

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут проблем матеріалознавства ім. І. М. Францевича Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05416930

Місцезнаходження: вул. Омеляна Пріцака, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Плющай Інна Вячеславівна
2. Inna V. Plyushchay

Кваліфікація: к. ф.-м. н., доцент, 01.04.13

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0003-1242-1358

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, Київ, 01033, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Михайлова Галина Юріївна
2. Halina Mykhailova

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

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-8187-7941

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: бульвар Академіка Вернадського, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Радченко Тарас Михайлович
2. Taras M. Radchenko

Кваліфікація: д. ф.-м. н., старший науковий співробітник, 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: 0000-0002-8593-6558

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи: Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05417331

Місцезнаходження: бульвар Академіка Вернадського, Київ, 03142, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR:

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Касаткін Олександр Леонідович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Касаткін Олександр Леонідович
Відповідальний за підготовку облікових документів	Балюк Антоніна Ігорівна
Реєстратор	Юрченко Тетяна Анатоліївна
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Тетяна Анатоліївна