

ВІДГУК ОФІЦІЙНОГО ОПОНЕНТА
на дисертаційну роботу
Гамалія Володимира Олександровича «Низькотемпературне
дослідження наноструктурованих поверхонь модельного перовскіту
титанату стронцію»,
подану на здобуття наукового ступеня
доктора філософії за спеціальністю 104 – «Фізика та астрономія»
з галузі знань 10 – «Природничі науки»

Перовскітні матеріали, такі як титанат стронцію, широко застосовуються в мікроелектроніці, каталізі, фотовольтаїці та багатьох інших галузях науки і техніки. Упродовж останніх десятиліть вони привертають увагу дослідників через їхні унікальні властивості. Незважаючи на це, існують принципово важливі проблеми у цій сфері, які залишаються все ще не вирішеними або до кінця не зрозумілими. Дисертаційна робота Гамалія В.О. у цьому сенсі демонструє **цілий ряд нових розробок**, що робить її вельми **актуальною** як з фундаментальної, так і з прикладної точки зору. В роботі виявлено **цілу низку нових ефектів з перспективою подальшого вивчення і застосування**, тому **наукова новизна та практична цінність дисертаційної роботи** не викликає сумнівів.

В дисертаційній роботі Гамалія В.О. досліджено монокристалічні поверхні модельного перовскіту титанату стронцію в інтервалі температур від кімнатної до температури рідкого гелію методом дифракції високоенергетичних електронів на відбиття (RHEED) із застосуванням методичних розробок здобувача та його керівника. **Оригінальні підходи**, застосовані у роботі, дали змогу знайти **нові ефекти** і детально проаналізувати їх природу. Дослідження проводились у рамках держбюджетних наукових тем і міжнародних програм в Фізико-технічному інституті низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАН України у відділі теплових властивостей і структури твердих тіл та наносистем.

Мету дисертаційної роботи було сформульовано як досягнення поглибленого розуміння взаємозв'язку структури та морфології поверхні титанату стронцію з його фізичними характеристиками і властивостями. З попередніх робіт було відомо, що, хоча зразки мають монокристалічну структуру, об'єкти дослідження демонструють цілу низку ефектів, які вказують на наявність дефектів будови кристалічної ґратки.

Структура та основні результати дисертаційної роботи

Дисертація, складається зі вступу, п'яти розділів та висновків.

У **вступі** наведено інформацію стосовно **актуальності** теми дисертаційної роботи, визначено мету і завдання, що стояли перед дисертантом, об'єкт, предмет дослідження та використані методи. Значну увагу приділено **науковій новизні та практичній цінності отриманих результатів**. Зазначено особистий внесок здобувача, надано інформацію про апробацію результатів. Також вказано структуру та обсяг дисертаційної роботи.

У **першому розділі «Структура та властивості перовскітів (огляд літератури)»** наведено детальний огляд загальних властивостей та особливостей будови структури перовскітів. Основну увагу приділено спонтанній та штучно створеній сегнетоелектриці, окреслено **практичну цінність цих матеріалів**. Окрему розглянуто перовскіт титанату стронцію, вивченню низькотемпературних властивостей якого і присвячена данна робота.

Другий розділ «Методика експерименту та обробки даних» присвячено методології, застосованій у дисертаційній роботі. Детально описано кріостат та устаткування, яке використовується для зйомки рентгенограм зразків при низьких температурах методом RHEED у двох режимах: традиційному при фіксованому куті дифракції та оригінальному, коли кут дифракції безперервно змінювався. Останній метод дозволив здобувачеві та його керівнику отримати повну проекцію оберненої квазідвовимірної кристалічної ґратки і зробити вимірювання параметрів кристалічної ґратки від поверхневих шарів досліджуваних зразків. Завдяки цьому підходу вдалося виявити цілу **низку нових ефектів**, які описано **вперше** у цій роботі.

У **третьому розділі «Поверхневі структурні переходи»** розглянуто аномалії на температурних залежностях параметрів кристалічної ґратки, які пов'язані із структурними змінами у досліджених зразках. Було встановлено, що вони пов'язані з відомими структурними перетвореннями, які відбуваються в поверхневих шарах, а також в об'ємі зразків. Вказані структурні зміни приводять до зростання параметрів ґратки, що дозволяє їх виявити завдяки застосуванню вимірювань параметрів кристалічної ґратки. Встановлено, що на відміну від об'єму, де структурні зміни спостерігаються

при фіксованій температурі, в поверхневих шарах вони відбуваються в температурному інтервалі.

У четвертому розділі «Площинне стиснення на поверхні» розглянуто цікавий ефект «площинного» стиснення кристалічної ґратки в перших поверхневих шарах, а також виявлено немонотонний характер змін параметрів кристалічної ґратки залежно від глибини проникнення електронів у кристалі. Проведено детальне порівняння експериментальних результатів з розрахунками отриманими комп'ютерним моделюванням методом DFT рівноважних параметрів ґратки, які виконано партнерами-теоретиками з латвійського університету.

П'ятий розділ «Поверхневі наноструктури» дисертації присвячено поверхневим наноструктурам, які мають різне походження. Розглянуто вплив особливого рельєфу поверхні “сходинки на поверхні”, що виникає завдяки кутовій розбіжності між реальною поверхнею та кристалографічними площинами. Другий тип рельєфу – “горбки на поверхні”, які з'являється завдяки травленню поверхонь м'якими розчинниками. Третій тип наноструктур пов'язаний з неспіврозмірністю поверхневих і об'ємних параметрів кристалічної ґратки, яка виникає завдяки площинному стисненню поверхні відносно об'єму. Показано, що всі розглянуті наноструктури мають однакову орієнтацію відносно системи координат, пов'язаної із монокристалом. Це робить їх перспективними кандидатами для контрольованого виробництва нанорозмірних поверхневих сегнетоелектричних доменів з метою їх подальшого застосування у мікроелектроніці та комп'ютерній техніці для побудови, наприклад, блоків оперативної пам'яті.

У «висновках» підсумовуються основні результати роботи наведені у кожному розділі.

Обґрунтованість та достовірність отриманих в дисертації результатів забезпечується застосуванням декількох найсучасніших і надійно апробованих методів структурного аналізу, а також оригінальних розробок. Важливим є також успішне порівняння експериментальних результатів і теоретичних розрахунків.

До дисертаційної роботи Гамалія В.О. є деякі зауваження та питання:

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 “прецензійні 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 повзуються з низькою 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.

Загальні висновки.

Дисертація В.О. Гамалія є завершеною науковою працею, важливою з фундаментальної точки зору для розуміння поверхневих властивостей титанату стронцію та інших перовскітів. Отримана у цих дослідженнях інформація має сприяти підвищенню ефективності використання подібних матеріалів в мікроелектроніці, каталізі та інших сферах, перш за все при низьких температурах. Роботу виконано на високому науково-технічному рівні з використанням найсучаснішої експериментальної техніки та методики розрахунків. Усі результати своєчасно та **повністю опубліковано в наукових журналах**, індексованих в SCOPUS та Web of Science, а також апробовані на вітчизняних та міжнародних наукових конференціях.

Вважаю, що у цілому дисертаційна робота **Гамалія Володимира Олександровича «Низькотемпературне дослідження наноструктурованих поверхонь модельного перовскіту титанату стронцію»** відповідає вимогам п. 6 «Порядку присудження ступеня доктор 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 січня 2022 р. № 44, а дисертант – Гамалій Володимир Олександрович заслуговує присудження йому наукового ступеня доктора філософії з галузі знань 10 — «Природничі науки», за спеціальністю 104 — «Фізика та астрономія».

ОФІЦІЙНИЙ ОПОНЕНТ

доцент кафедри фізики твердого тіла, фізичного факультету Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна, кандидат фізико-математичних наук, доцент



Дмитро РОХМІСТРОВ

Підпис доцента кафедри фізики твердого тіла Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна, кандидата фізико-математичних наук, доцента Рохмістрова Дмитра Володимировича засвідчую.

Начальник відділу кадрів Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна



Олена ГРОМИКО