

**«ЗАТВЕРДЖУЮ»**

Директор Інституту металофізики  
ім. Г.В. Курдюмова НАН України  
академик НАН України  
Валентин ТАТАРЕНКО

"17"

0541/331

2025 р.

## В И Т Я Г

з протоколу № 8 від 17 вересня 2025 р. засідання наукового семінару за науковими  
напрямами *«Електронна структура та властивості металів і сполук на їх основі»,*  
*«Наномасштабні та наноструктуровані системи»»*  
Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України

БУЛИ ПРИСУТНІ: акад. НАН України, д.ф.-м.н., проф. Татаренко В.А., д.ф.-м.н.,  
проф. Лізунов В.В., к.ф.-м.н. Курган Н.А., д.ф.-м.н. Радченко Т.М.,  
к.ф.-м.н. Михайлова Г.Ю., д.ф.-м.н. Карнаухов І.М., д.ф.-м.н., проф.  
Лень С.Г. та інші наукові працівники Інституту, загалом 24 людини.

### СЛУХАЛИ:

Наукову доповідь аспіранта відділу фізики наноструктур Сухенка Ігоря Віталійовича  
за матеріалами дисертаційної роботи *«Електронна структура апатитів свинцю та кальцію,  
допованих перехідними металами та карбонат-іонами»*, представленої на здобуття  
наукового ступеня доктора філософії із спеціальності «105 Прикладна фізика та  
наноматеріали».

Тему дисертаційної роботи *«Електронна структура апатитів свинцю та кальцію,  
допованих перехідними металами та карбонат-іонами»* затверджено на засіданні Вченої  
ради Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України (протокол № 9 від 10 липня  
2025 року). Науковим керівником затверджено д.ф.-м.н., проф. Карбівського Володимира  
Леонідовича (протокол № 12 від 15 грудня 2022 року). Дисертаційну роботу виконано у  
відділі фізики наноструктур Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України.

У доповіді здобувач обґрунтував актуальність теми дисертації, сформулював мету та  
завдання дослідження, довів новизну одержаних результатів та їхнє практичне значення.

ПРИ ОБГОВОРЕННІ акад. НАН України Татаренко В.А., д.ф.-м.н. Карнаухов І.М.,  
ПИТАННЯ ЗАДАЛИ: д.ф.-м.н. Радченко Т.М., д.ф.-м.н. Лізунов В.В.

УХВАЛИЛИ: Висновок щодо дисертаційної роботи аспіранта Інституту металофізики  
ім. Г.В. Курдюмова НАН України (м. Київ) Сухенка І.В. у наступному  
формулюванні.

## ВИСНОВОК

### про наукову та практичну цінність дисертації

#### 1. Актуальність теми та її зв'язок з планом основних науково-дослідних робіт

Апатитні сполуки характеризуються вибірковою структурною гнучкістю та здатністю до значних ізоморфних заміщень, що зумовлює широке застосування їх в різноманітних галузях науки та техніки: від біомедицини й екології до електроніки та енергетичних технологій. Особливо перспективним напрямом є використання апатитних структур як функціональних матеріалів із керованими електронними, оптичними та магнітними властивостями. Зокрема, значний інтерес привертають дослідження впливу заміщень у катіонній та аніонній підгратках на електронну структуру й фізичні властивості цих матеріалів, що відкриває нові можливості для створення матеріалів зі специфічними характеристиками.

Серед численних можливих варіантів ізоморфних заміщень особливе місце посідають апатити, доповані перехідними металами, зокрема Купрумом, завдяки їхнім нестривіальним електронним і магнітним станам. Факт можливої реалізації сильнокорельованих квантових станів, включаючи феромагнетизм і потенційну надпровідність, стимулює поглиблене дослідження структури, електронних і магнітних властивостей таких матеріалів.

Не менш важливим є вивчення фундаментальних механізмів, які визначають зміну електронної структури та стабільність апатитних структур під впливом заміщень як катіонів (перехідними елементами), так і аніонів (карбонатних, галогенідних груп). Саме ці механізми визначають потенційні сфери застосування модифікованих апатитів, включаючи використання їх у фотокаталізі, електрокаталізі, енергетичних технологіях (зокрема у стабілізації гібридних перовськітів) та оптоелектронних пристроях. Тому комплексне дослідження впливу ізоморфних заміщень у різних типах апатитних структур із використанням сучасних теоретичних і експериментальних методів є актуальним та важливим завданням фізики твердого тіла.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дослідження, результати яких викладено у дисертаційній роботі, виконувались у відділі фізики наноструктур Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України згідно з індивідуальним планом роботи дисертанта. Вони узгоджуються з науковими напрямками відділу та мають змістовний зв'язок з тематикою держбюджетних науково-дослідних робіт, які фінансуються НФДУ та НАН України, зокрема:

- «Функціональні структури перовськітних сонячних елементів на основі апатитоподібних сполук» (2022-2023 рр.), номер держреєстрації 0122U002423;
- «Сонячні елементи на основі перовськітів та апатитів» (2023-2024 рр.), номер держреєстрації 0123U100914,
- «Апатитоподібні структури як перспективне сімейство надпровідних матеріалів» НФДУ (2024-2026), номер держреєстрації 0124U003949.

**Мета дослідження.** Мета дисертаційної роботи полягала у встановленні основних закономірностей формування структурних, електронних та магнітних властивостей апатитоподібних сполук за ізоморфних заміщень в катіонній та аніонній підгратках. Для досягнення поставленої мети виконувались наступні завдання.

1. Дослідження впливу допування в катіонній підгратці апатитів перехідними металами на їхню електронну структуру, ширину забороненої зони й характер хімічних зв'язків.

2. Визначення змін в електронній структурі та структурні модифікації арсенатних апатитів при заміні катіонів Кальцію на Кадмій.

3. Встановлення структурних, електронних і спектральних особливостей карбонат-заміщених апатитів.

4. Визначення енергетичної стабільності і структурних особливостей заміщених Купрумом олів'яних апатитів  $(\text{Pb}_9\text{Cu}(\text{XO}_4)_6\text{Y}_2, \text{X} = \text{P, V, As}, \text{Y} = \text{F, Cl, Br, O})$ .

5. Аналіз магнітних взаємодій та електронних особливостей, зокрема виникнення плоских зон і можливості нетривіальних квантових фаз у заміщених Купрумом апатитах.

## **2. Особистий внесок автора в одержання наукових результатів**

Дослідження, результати та висновки, що представлені в дисертації та виносяться на захист, виконано та сформульовано особисто автором. До них належать аналіз літературних даних, вирішення поставлених задач з передбачення матеріалів та теоретичного аналізу, експериментального дослідження з метою встановлення зв'язку між електронною структурою та фізичними властивостями сполук. Разом з науковим керівником було сформульовано мету та план досліджень. Автор брав участь в інтерпретації одержаних результатів, написанні, оформленні та підготовці до друку статей і тез доповідей, в яких висвітлено основні результати дисертаційної роботи. Зазначимо внески автора дисертації та співавторів за кожною статтею, що була опублікована за даними дисертаційної роботи.

1. [1]. Внесок Сухенка включав проведення оригінальних DFT-обчислень, написання основної частини огляду та формулювання висновків і перспектив; Карбівський --- співавтор структури огляду, критичного аналізу та узгодження з літературою, редагування у межах лексики кристалохімії апатитів.

2. [2]. Сухенко виконав аналіз забороненої зони за ізоморфних заміщень 3d-металами (Fe, Ni, Cu, Mg), створення карт розподілу електронної густини, а також інтерпретацію спектроскопічних даних (XPS); долучився до формулювання висновків. У цій статті Карбівський (провідний спеціаліст за тематикою стосовно апатитів) і Курган координували постановку експериментальних задач, вимірювання спектрів та інтерпретацію оптичних/ІЧ-даних; Романський розробив розрахунковий блок; Хаптуш забезпечив методичну підтримку спектроскопічних досліджень; Карбівська виконала обробку даних та літературний огляд.

3. [3]. Роль Сухенка була у допоміжній розрахунках (релаксації ґратки, параметрів комірки, тестах збіжності, map електронної густини). Сорока запропонував концепцію, забезпечив загальне керівництво в розрахунках густини станів, іонних радіусів, зарядів; Карбівський задав постановку задачі та інтерпретацію в контексті кристалохімії апатитів; Карбівська надала літературну й редакційну допомогу; Касіяненко, Смоляк забезпечили перевірку коректності інтерпретацій.

4. [4]. Сухенко розробив та виконав обчислювальну частину, виконав інтерпретацію

XPS/FTIR-спектрів та порівняння з DFT-результатами (стосовно зсуву основних рівнів, зростання іонності зв'язку за  $\text{CO}_2$ -допування, кореляції з деформацією ґратки), підготував основний текст та висновки; Карбівський задав ідею та постановку задачі; Курган забезпечила редагування та кореспонденцію; Іванов зробив синтез зразків, рентгеноструктурний аналіз, Неділько перевіряв спектроскопі результати; Ключенко відповідав за підготовку зразків для XPS та візуалізацію даних.

Серед даних, що не були опубліковані, зокрема, для розділу 6: дифрактограми були одержані за участю Шулими С.І, а спектри ЯМР виміряні Смоляк С.С.

### **3. Ступінь достовірності результатів, обґрунтованість наукових положень та висновків, сформульованих в дисертації**

Достовірність одержаних результатів у роботі досягається за рахунок використання високочутливих експериментальних методів дослідження та застосування комплексу незалежних експериментальних та теоретичних методів, результати яких погоджуються між собою.

Сформульовані в дисертаційній роботі наукові положення та висновки є обґрунтованими і не суперечать сучасним науковим уявленням та фактам.

### **4. Ступінь новизни результатів, одержаних в дисертації**

В рамках виконання дисертаційної роботи одержано наступні основні нові наукові результати.

1. За результатами теоретичного аналізу енергетичної стабільності заміщених Купрумом олив'яних апатитів вперше показано стабільність ванадієвого підсімейства.
2. Вперше показано енергетичну вигідність феромагнітного впорядкування для сімейства заміщених Купрумом олив'яних ванадат-апатитів.
3. Вперше показано наявність металічного стану в сполуці  $\text{Pb}_9\text{Cu}(\text{VO}_4)_6\text{Br}_2$ , що контрастує з іншими представниками свого сімейства.
4. Вперше синтезовано й охарактеризовано зразки сполуки  $\text{Pb}_9\text{Cu}(\text{VO}_4)_6(\text{OH})_2$  та підтверджено ізоморфну інкорпорацію Купруму в дану структуру.
5. Вперше з'ясовано симетрійні особливості інкорпорації карбонатного йону в структуру олив'яного апатиту у порівнянні з кальцієвим аналогом.

### **5. Наукова та практична цінність одержаних автором результатів**

Одержані результати доповнюють розуміння впливу ізоморфних заміщень на властивості апатитних сполук і відкривають перспективи використання цих матеріалів у фотокаталізі, електрокаталізі, енергетичних та оптоелектронних технологіях, а також для пошуку нових квантових матеріалів із нетривіальними електронними й магнітними фазами та надпровідністю. Сформульовані в роботі рекомендації щодо вибору оптимальних складів і умов синтезу апатитних матеріалів можуть бути використані в подальших експериментальних і прикладних розробках у зазначених напрямках.

#### **6. Перелік робіт, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:**

1. **Sukhenko I.V.**, Karbivskyy V.L. Reflecting on the LK-99 fervour: insights and future prospects // Journal of Physics: Condensed Matter. 2024. Vol. 37, No. 8. P. 083002. (IOP Publishing) (Q2) <https://doi.org/10.1088/1361-648x/ad9804>
2. 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. Vol. 135, No. 6. P. 065102. (AIP Publishing) (Q2) <https://doi.org/10.1063/5.0179754>
3. Soroka A.P., **Sukhenko 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. Vol. 51, No 3. P. 375–383. (Q4) <https://doi.org/10.1063/10.0035843>
4. **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, Article No. 147563. (Q2) <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2025.147563>

#### **7. Матеріали дисертації доповідалися на наступних конференціях:**

1. Kurgan N.A., Karbivskyy V.L., **Sukhenko I.V.**, Smolyak S.S.. Physical properties of lead oxoapatites // X Ukrainian scientific conference on physics of semiconductors (USCPS-10). May 26–30, 2025, Uzhhorod, Ukraine. P. 69.
2. Kurgan N.A., Karbivskyy V.L., **Sukhenko I.V.**, Shulyma S.I.. Structure and optical properties of lead vanadate apatite with copper substitution // X Ukrainian scientific conference on physics of semiconductors (USCPS-10). May 26–30, 2025, Uzhhorod, Ukraine. P. 75.
3. **Sukhenko I.V.** Claim of discovery of a room-temperature superconductivity in copper-substituted lead apatite: a review (2023) // Всеукраїнська конференція «Сучасне матеріалознавство. Матеріали та технології» (CMMT-2023).
4. **Сухенко І.В.**, Карбівський В.Л. Модифікація електронної структури кальцієвих апатитів шляхом ізоморфних заміщень (2023) // Всеукраїнська конференція «Сучасне матеріалознавство. Матеріали та технології» (CMMT-2023).
5. **Sukhenko I.V.**, Shulyma S.I. Beyond LK-99: first-principles study of the crystal & electronic structure of copper-substituted lead vanadate apatite // 12th International Conference "Nanotechnology and Nanomaterials" (NANO-2024), August 21–24, 2024, Uzhhorod, Ukraine. P. 429. <https://nano-conference.iop.kiev.ua/proceedings/>
6. Smolyak S.S., Kurgan N.A., **Sukhenko I.V.**, V.L. Karbivskyy. Aspects of electronic structure of hydroxypyromorphite surface –  $\text{Pb}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$  // XX International Scientific Conference "Electronics and Applied Physics" – APHYS 2024. October 22–25, 2024, Kyiv, Ukraine. P. 78. [http://www.aphys.knu.ua/images/APHYS\\_Book\\_2024\\_content.pdf](http://www.aphys.knu.ua/images/APHYS_Book_2024_content.pdf).
7. **Sukhenko I.V.**, Karbivskyy V.L., Kurgan N.A.. First-principles study of magnetic ground states of a copper–lead apatite series // XX International Scientific Conference "Electronics and Applied

Physics"– APHYS 2024. October 22–25, 2024, Kyiv, Ukraine. P. 39.  
[http://www.aphys.knu.ua/images/APHYS\\_Book\\_2024\\_content.pdf](http://www.aphys.knu.ua/images/APHYS_Book_2024_content.pdf)

8. **Sukhenko I.V.**, Karbivskyi V.L., Kurgan N.A., Shvachko N.K., Zaika V.V., Smolyak S.S., Shulyma S.I.. Electronic structure, orders and correlations in copper-substituted lead apatites probed via DFT+DMFT // 30th International Conference on Low Temperature Physics, August 7–13, 2025, Bilbao, Spain. P. 522. <https://www.lt30.es/wp-content/uploads/2025/08/Book-of-abstract-pdf>

Опубліковані результати Сухенка І.В. відповідають темі та змісту дисертаційної роботи «Електронна структура апатитів свинцю та кальцію, допованих перехідними металами та карбонат-іонами».

Науково-технічна експертиза дисертації Сухенка І.В. (виконана за допомогою програмних засобів вільного доступу, зокрема, <https://my.plag.com.ua/>) показала, що дисертація є оригінальною роботою без елементів фальсифікації, копіювання, фабрикації, плагіату та запозичень.

За своїм змістом дисертація Сухенка І.В. є завершеною науково-дослідною роботою, яку виконано на високому науковому рівні; за новизною одержаних результатів, теоретичною та практичною цінністю, змістом та оформленням повністю відповідає вимогам до дисертацій на здобуття ступеня доктора філософії та відповідає спеціальності «105 Прикладна фізика та наноматеріали».

Враховуючи викладене вище, семінар рекомендує дисертаційну роботу аспіранта відділу фізики наноструктур Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України Сухенка І.В. «Електронна структура апатитів свинцю та кальцію, допованих перехідними металами та карбонат-іонами» до захисту на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю «105 Прикладна фізика та наноматеріали» у разовій спеціалізованій вченій раді в Інституті металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України.

Вченій раді ІМФ НАН України запропонувати утворити разову спеціалізовану вчену раду у складі:

Голова ради: д.ф.-м.н., ст.д. Касаткін Олександр Леонідович;

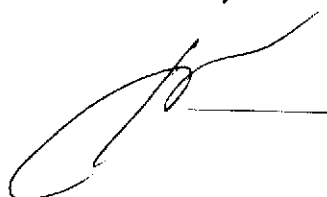
Рецензенти: д.ф.-м.н., с.н.с. Радченко Тарас Михайлович, к.ф.-м.н., с.н.с. Михайлова Галина Юріївна;

Опоненти: д.ф.-м.н., с.н.с. Хижун Олег Юліанович (Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича Національної академії наук України), к.ф.-м.н., доцент Плющай Інна Вячеславівна (Київський національний університет імені Тараса Шевченка).

Голова семінару  
академік НАН України,  
доктор фіз.-мат. наук, проф.

 Валентин ТАТАРЕНКО

Секретар семінару  
к.ф.-м.н.

 Галина МИХАЙЛОВА