

## Рецензія

рецензента, доктора фізико-математичних наук, професора, професора кафедри інноваційних технологій та методики навчання природничих дисциплін Держаного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського»  
Соловйова Володимира Миколайовича  
на дисертацію Попряги Діани Олександрівни  
«Кластерно-модифіковані гетероструктури з нанокластерною підсистемою», подану на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 – Прикладна фізика та наноматеріали

### *Актуальність обраної теми.*

Логіка дисертаційного дослідження Діани Попряги побудована досить просто: від теорії до експерименту, а від нього до практичного застосування. З позиції рецензента маю оцінити ці результати, визначити їх вагомість для науки, принаймні, з трьох позицій: по-перше, актуальність вибору теми дисертаційного дослідження; по-друге – визначити рівень математичної та фізичної моделі, категорійно-понятійного апарата дослідження, їх адекватну реалізацію в ході експерименту і по-третє, з'ясувати ступінь як наукової новизни і теоретичного внеску, так і практичну значущість одержаних здобувачем даних.

Отже, по-перше. Тема дослідження є актуальною. Сьогодні, для сучасних технологій існує об'єктивна потреба у створенні матеріалів нового типу, з керованими, і, що є особливо важливим, з наперед заданими, а тому й, відомими властивостями. Можна змінити структуру речовини у термічній спосіб. За допомогою радіації можна також впливати на фізичні властивості твердих тіл. Але авторкою запропонована ідея управління та контролю за характеристиками речовини на квантово-розмірному рівні шляхом формування нанокластерної підсистеми у складі плівкового гетеропереходу (ГП). Тобто мова йде про дослідження властивостей кластеризованих гетероструктур, склад яких формує «нанокластерна підсистема».

Відтак, щодо першої дефініції – кластеризована гетероструктура. Як на мою думку, насамперед цей тип речовини відкриває нові перспективи щодо вирішення найважливіших завдань у динамічному розвитку сучасних

технологій: наноелектроніки, нанооптики, наномеханіки тощо, а також відповідністю теми дисертації напрямом модернізації виробництва на державному рівні.

Щодо другої дефініції - нанокластерна підсистема (далі НКП) - зауважу, що мету, яку поставила перед собою Діана Попряга, цитую: «вивчення міжатомної взаємодії, визначення нових закономірностей формування і фізичних властивостей низьковимірних систем у вигляді нанокластерів та нанокластерної підсистеми твердого тіла», уточнюють і доповнюють сформульовані задачі дослідження, де вже передбачено визначення характеристик нанокластерів та НКП твердого тіла, з'ясування механізмів формування мікрофази від кластерного до фрактального формату в монофазі на субстратній основі та в об'ємі матричного матеріалу; дослідження механізмів формування структури та фізичних властивостей НКП у складі ГП; вивчення впливу фотонів, і релаксаційних процесів, зумовлених цим впливом на фізичні властивості твердотільних гетероструктур у вигляді плівкового ГП з НКП.

Реалізація авторського пошуку обраної проблеми відображено в науковій новизні дослідження (с.13 дисертації). Констатую, що вони адекватно віддзеркалюють ті наукові доробки, які були закладені авторкою у понятійному апараті і надалі реалізовані в експериментальній методиці, що детально описана у розділі 5 дисертації.

Не можна не виокремити в позитивному контексті й такі аспекти дослідження, як його теоретичну і практичну значущість. Акцентую увагу на наступних моментах: а) авторкою, на основі запропонованих математичної та фізичної моделі, розроблені принципи побудови та існування стабільних НК, виявлено принципи формування НКП на основі кремнія; б) отримані результати мають конкретну практичну спрямованість, і можуть бути використані при розробці нових типів матеріалів – кластеризованих речовин, наноматеріалів; в) існує важливий аспект експериментальної апробації результатів у вигляді створеного дослідного зразку твердотільної гетероструктури

(гетерофотоелемент), що включає НКП із просторово складним розподілом НК (в іспитовому центрі «Політех» м. Одеси).

Відтак, слід констатувати, що мета і завдання успішно вирішені і відповідають рівню дисертації на здобуття наукового ступеня доктора філософії.

Відтепер детально зупинимось на аналізі змістовного аспекту дисертації.

У **першому розділі** проведено ґрунтовний аналіз робіт, де показано передумови формування ідеї кластеризації речовини. Так Е.І. Нарт, J.W. Воаг показали, що електрони можуть виступити у якості ініціюючого фактору і структурними елементами в механізмі кластеризації матричного середовища. Далі, цей підхід отримав розвиток у роботах Л.Д.Ландау, згідно до яких електрон, що рухається в діелектрику, може поляризувати його. Наступний крок був зроблений І.М. Ліфшицем та С.А. Гредескулом, які розглянули взаємодію електрона з середовищем за допомогою слабких короткодійних сил, що викликають, при низьких температурах, досить сильну поляризацію з утворенням кластера - щільного скупчення елементів середовища у досить великому об'ємі; формування кластерів пов'язано з виникненням ефективної взаємодії дальньої дії важких частинок через електрон. У такому випадку кластер можна визначити, як одну фазу, а оточуючу його область - іншою фазою. Здобувачка визначає цю область, як матричне оточення. Розмаїття кластерних підсистем речовини є досить широким: сольвати, гідрати, асоціати, зони Гінье-Престона, активні центри каталіза, центри прихованого фотографічного зображення тощо. Знаходячись у контексті цього огляду, Попряга Д., визначає сенс таких понять, як «нанокластер», «твердотільна кластеризована речовина» та інші.

У **другому розділі**, розглянуто методи контролю та проведено їх класифікацію, що дозволяє розробити основні принципи не тільки теорії формування НКП речовини, але й запропонувати методи контролю її властивостей, функціональної діагностики, механізми формування та властивості від сольватованого формату до квазікристалічного стану речовини. Показано, що поняття НКП речовини є обґрунтованим і охоплює напрямок, що

відкриває широкі перспективи у форматі розробки засобів і методів неруйнівного контролю речовини. Кластерний підхід дозволяє по-новому сформулювати матеріалознавчу концепцію і позначає перспективний рубіж у фізичному матеріалознавстві та структурно-функціональній діагностиці складу речовини.

У *третьому* розділі здобувачка розкриває концепцію структурно-морфологічної діагностики НК, їх синтезу в єдину НКП, від субколоїдного до нанорозмірного формату в монофазі на субстратній основі і в об'ємі матричного матеріалу. Такий підхід виправдовує себе з огляду на реалії експериментальних даних з сублімації НК та їх лазерного випаровування з поверхні твердого тіла. У дослідках цього типу зафіксовано лише результат – є НК, а от інформація про те, як він утворився, скільки часу існує, якими фізико-хімічними властивостями володіє залишається відкритою. Тому здобувачка, пропонує органічно поєднати методи комп'ютерного моделювання з експериментальними результатами, пропонуючи проводити вивчення НКП речовини з позицій фрактальної концепції. Це збільшує ймовірність достовірності отриманих результатів.

У *четвертому* розділі, пропонується математична модель щодо визначення властивостей НК твердого тіла, результати апробації якої отримали логічний розвиток у фізичних моделях, що формують НКП. Запропонований параметризований метод функціоналу електронної густини, розширює можливості розрахунку досить великих НК – і це є важливим теоретичним результатом. Проведено модельний аналіз матричного оточення НК кремнія, визначено вплив пасиваторів на їх властивості, визначені оптичні спектри тощо.

У *п'ятому* розділі наведені результати дослідження гетеропереходу (ГП)  $p\text{Cu}_2\text{S}-n\text{Si}$  з НКП, на основі якого можуть вирішуватися задачі сучасної функціональної наноелектроніки, зокрема, у процесі розробки фотоперехідних елементів. Здобувачем запропонована технологія отримання такого ГП, що ґрунтується на формуванні НКП. Визначені оптимальні режими роботи гетерофотоелемента на основі  $p\text{Cu}_2\text{S}-(\text{Si}-\text{НКП})-n\text{Si}$  ГП. Запропонована технологія виготовлення  $p\text{Cu}_2\text{S}-(\text{Si}-\text{НКП})-n\text{Si}$  ГП, забезпечує плаский зоно-

енергетичний профіль переходу, що відкриває перспективи створення фотоперетворювачів енергії. Зміна структури ГП може відбуватися через процес імплантації кластерного растра острівкової структури на Si підкладку перед напиленням шару  $\text{Cu}_2\text{S}$ . Варіювання швидкості формування НК, температури підкладки, відкриває можливість імплантації НК розміром 10-50 ангстрем. На таких ГП здобувачкою вперше спостерігався спектрально-інверсований фото-вентильний ефекти. Попрягою Д. запропоновані механізми, що пояснюють цей ефект. Доведено, що при збільшенні розмірів НК до сотні і більше ангстрем фотоперетворювальний ефект не лише не підсилюється, але й навпаки, зовсім зникає, поступаючись іншому ефекту. Показано, що такий ефект на  $p\text{Cu}_2\text{S}(n\text{Si})$ -ГП, призводить до підвищення фоточутливості елементів при великих освітленнях. Отже, виготовлення фотоелемента має включати операцію нанесення на поверхню кремнієвої пластини (при  $100^\circ\text{C}$ ) металокластерного растру колоїдної дисперсності (з розміром НК більшими за 20 ангстрем). Цей фотоприймач, може бути використаний в конструкціях бістабільних оптронів, разом з біхроматичним світлодіодом на основі арсенида галія з керованою частотою випромінювання.

Таким чином, результати досліджень стимулюють постановку нових експериментів, що можуть бути спрямовані на вдосконалення технології виготовлення нових приладів на основі НКП твердого тіла.

**Мова та стиль викладання.** Стиль викладання матеріалів дослідження, наукових положень, висновків та рекомендацій дозволяє зрозуміти матеріал дисертації, що свідчить про вміння автора викладати власні думки.

**Апробація результатів дисертації і публікації.** Основні результати та положення дисертації висвітлено у наукових публікаціях: 4 статі у фахових виданнях України (категорія Б), 1 стаття у міжнародному журналі, 2 публікації у матеріалах конференцій.

**Структура та обсяг роботи.** Дисертація складається із вступу, п'яти розділів, висновків до розділів, загальних висновків, списку використаної літератури, додатків. Обсяг основного тексту роботи складає 172 сторінок

### Зауваження та дискусійні питання.

Оцінюючи, в цілому, позитивно дисертаційне дослідження Діани Попряги, слід висловити деякі зауваження:

1. Чому у роботі не наведені карти розподілу електронної густини у НК кремнію?
2. Чи проводилися оцінки енергії міжатомної взаємодії з використанням емпіричних потенціалів міжатомної взаємодії?
3. Цінним результатом дисертації були б дослідження можливості формування ГП не лише у вигляді  $pCu_2S$ -НКП- $nSi$  але й іншого типу матричного матеріалу.
4. У дисертації є граматичні недоліки, мовленнєві огріхи.

Але ці зауваження мають дискусійний характер і не впливають на рівень виконаного Діаною Попрягою дисертаційного дослідження.

### Загальний висновок.

Дисертація Попряги Діани Олександрівни «Кластерно-модифіковані гетероструктури з нанокластерною підсистемою» є завершеним, самостійним науковим дослідженням. Вона відповідає вимогам до дисертацій на здобуття наукового ступеня доктора філософії, а її автор – Попряга Діана Олександрівна заслуговує присудження наукового ступеня доктора філософії зі спеціальності 105 – Прикладна фізика та наноматеріали.

Рецензент

доктор фізико-математичних наук, професор,  
професор кафедри інноваційних технологій  
та методики навчання природничих дисциплін  
Держаного закладу  
«Південноукраїнський національний  
педагогічний університет  
імені К. Д. Ушинського»

Володимир СОЛОВЙОВ

