

## Рецензія

рецензента, кандидата технічних наук, доцента, доцента кафедри інноваційних технологій та методики навчання природничих дисциплін Держаного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського»

Дончева Івана Івановича

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 дисертації.

Сучасний розвиток наноелектроніки та фізики твердого тіла характеризується переходом від традиційних об'ємних матеріалів до низьковимірних систем, властивості яких визначаються квантово-розмірними ефектами. У цьому контексті фізика твердого тіла та нанофізика становлять одну з ключових галузей сучасної прикладної фізики, що досліджує фундаментальні властивості речовини на мікро- та нанорівнях. Модифікування матеріалів засобами кластеризації розширює горизонти фізичного матеріалознавства у наноелектроніці, нанорівневій інженерії та біомедицині.

Дослідження кластерно-модифікованих гетероструктур має велике прикладне значення для створення високотехнологічних матеріалів, здатних забезпечити прорив у галузях оптоелектроніки, енергетики та інформаційних технологій. У зв'язку зі стрімким зростанням вимог до точності, чутливості та швидкодії електронних приладів, тема дисертаційної роботи, спрямована на вивчення формування нанокластерних підсистем і їх впливу на властивості гетероструктур, є своєчасною та вкрай актуальною.

У першому розділі дисертантка здійснює фундаментальний ретроспективний та сучасний аналіз проблеми кластеризації речовини. Відштовхуючись від класичних концепцій Л. Ландау, С. Пекара (теорія полярона) та І. Ліфшиця (взаємодія електрона з середовищем), авторка простежує еволюцію уявлень від сольватованих електронів до макроскопічних скупчень (флуктуонів та фазонів). На високому теоретичному рівні обґрунтовується перехід від континуальних моделей середовища до дискретних моделей, де електрон розглядається як ініціатор синергетичної кластеризації. Розділ завершується чіткою постановкою задачі: необхідністю створення нових фізико-математичних моделей для опису нанокластерної підсистеми (НКП) та розробки методів функціональної діагностики гетероструктур.

Другий розділ присвячений класифікації та вибору оптимальних методів неруйнівного контролю кластеризованої фази (від сольватів до квазікристалічного стану). Авторка доводить обмеженість стандартних методів

дефектоскопії для об'єктів квантово-розмірного масштабу і теоретично обґрунтовує перехід до оптичних (спектральних) та фотоелектричних методів діагностики. Вводиться системний підхід до аналізу вольт-амперних (ВАХ) та люкс-амперних характеристик (ЛАХ) гетеропереходів з НКП. Важливим здобутком розділу є концептуалізація квазікристалічного стану НК (зокрема, використання візерунків Пенроуза та ікосаедрів Маккея) для пояснення структур без трансляційної симетрії, що закладає базу для подальшого моделювання.

У третьому розділі розкрито кінематику та фізичну природу формування НКП на базових матрицях (зокрема, на поверхні Si). Авторка аналізує конденсатно-острівний механізм та фрактальні методи росту, детально розглядаючи термодинамічні моделі росту Франка-ван дер Мерве, Фольмера-Вебера та Странського-Крастанова. Теоретичні викладки (з використанням моделі Ізінга для опису двовимірних адсорбційних решіток) блискуче підкріплюються інтерпретацією даних скануючої тунельної мікроскопії (СТМ) та атомно-силової мікроскопії. Доводиться, що НКП відіграє роль рухливого 3D-електрода і здатна функціонально модифікувати властивості базового напівпровідника.

Четвертий розділ містить потужний обчислювальний апарат роботи. Для подолання складнощів традиційних ab initio розрахунків (рівнянь Хартрі-Фока-Рутаана), дисертантка розробила та застосувала параметризований метод функціоналу електронної густини (ПФЕГ) у поєднанні з молекулярною динамікою (МД). За допомогою алгоритмів GAMESS (в наближеннях АМІ, РМЗ, РМЗ) проведено оптимізацію геометрії та розрахунок енергетичних характеристик (НОМО-LUMO) малих нанокластерів і кремнієвих фулереноподібних поліедрів. Особливу наукову цінність становить аналіз «ендоедричних» комплексів — НК з інкапсульованими іонами, де досліджено стабілізуючий вплив катіонів на ширину забороненої зони кластера.

П'ятий розділ є логічним експериментальним вінцем роботи. Тут представлено результати створення та дослідження плівкового гетеропереходу  $\text{SpCu}_2\text{S}-(\text{Si}-\text{НКП})-\text{nSi}$ . Авторка практично реалізувала технологію імплантації кластерного растру субколоїдної дисперсності (розміри НК 10-150 Å) на кремнієву підкладку. Головним експериментальним здобутком є виявлення та детальне фізичне пояснення **спектрально-інверсованого фотовентильного ефекту**. Доведено, що цей ефект виникає завдяки конкуренції двох механізмів: класичного фотоэффекту в  $\text{Sp-nS}$  переході та специфічного кластерного механізму за схемою «fed in - feed out» (екстракція електронів на кластерні центри). Також обґрунтовано перспективи використання таких фотоелементів у бістабільних оптронах та приймачах для надвеликих доз опромінення.

#### **Оцінка наукової новизни одержаних результатів**

Дисертаційна робота містить вагомі наукові результати, які отримані вперше або набули подальшого розвитку. До основних здобутків наукової новизни належать:

Встановлення загальних фізичних закономірностей утворення низьковимірних систем у вигляді Si-нанокластерів на основі принципів масштабної інваріантності переходу від модельної до реальної системи у вигляді багаторівневої нанокластерної підсистеми (НКП).

Розробка математичної моделі об'єкта нанометрового діапазону зі складною просторовою структурою, яка добре описує геометрію та морфологію нанокластерів кремнію.

Запропоновано нову модель формування НКП речовини шляхом синергетичного гетерофлуктуаційного об'єднання нанокластерів.

Вперше виявлено спектрально-інверсований ефект у гетеропереході типу  $p\text{Cu}_2\text{S}\text{-НКП-nSi}$  та аномально високу чутливість фотоелементів на цій основі при надвеликих дозах опромінення фотонами.

### **Практичне значення одержаних результатів**

Практична цінність роботи полягає у тому, що результати теоретичного опрацювання електронних та оптичних властивостей нанокластерів кремнію в ізольованому стані та матричному оточенні можуть бути безпосередньо використані для розвитку функціональної кремнієвої електроніки.

Автором розроблено метод контролю фізичних властивостей та складу твердотільних гетероструктур з НКП. Крім того, розроблено реальну технологію виготовлення фотопристрою за допомогою операції нанесення на поверхню пластини кластерного растру субколоїдної дисперсності.

### **Ступінь обґрунтованості наукових положень, висновків і рекомендацій.**

Обґрунтованість і достовірність результатів забезпечується коректним і комплексним використанням сучасних методів дослідження. Теоретичне моделювання ґрунтувалося на комбінованому застосуванні *ab initio* методів (на основі функціоналу електронної густини у параметризованому вигляді) та модифікованих потенціалів міжатомної взаємодії Стілінджера-Вебера. Експериментальні дослідження властивостей підтверджені передовими методами електронної та атомно-силової мікроскопії (СТМ та АТМ). Усі висновки логічно випливають з отриманих результатів комп'ютерного моделювання та натурних експериментів.

### **Повнота викладу результатів дисертації в наукових публікаціях.**

Матеріали дисертації достатньою мірою висвітлені в науковому просторі. Основні результати представлені у 7 наукових працях, серед яких: 4 статті у фахових виданнях України (категорія «Б»), 1 стаття в іноземному міжнародному періодичному виданні («Technium: Romanian Journal of Applied Sciences and Technology») та 2 публікації апробаційного характеру в матеріалах міжнародних науково-практичних конференцій. Це повністю відповідає вимогам МОН щодо кількості та якості публікацій для здобувачів ступеня PhD.

## Зауваження та дискусійні питання

Позитивно оцінюючи дисертаційну роботу загалом, варто висловити декілька зауважень та побажань дискусійного характеру для подальших досліджень автора:

1. У роботі детально досліджено спектрально-інверсований фотоприймальний ефект та вказано на перспективність його використання у фотоприймачах, проте доцільно було б навести більш розширений аналіз часової стабільності (деградації) цих пристроїв за реальних умов експлуатації.

2. Автор справедливо зазначає, що детальний розбір механізмів струмового перенесення (МСП) не входив до кола основних завдань через їх залежність від варіацій технології. Проте, більш розширений аналіз генераційно-рекомбінаційних процесів міг би суттєво доповнити розуміння фізики досліджуваного гетеропереходу.

Наведені зауваження мають переважно рекомендаційний характер і жодним чином не знижують високого наукового рівня дисертаційного дослідження.

### Загальний висновок

Дисертаційна робота Попряги Діани Олександрівни на тему «Кластерно-модифіковані гетероструктури з нанокластерною підсистемою» є самостійним, завершеним науковим дослідженням, яке вирішує важливе науково-прикладне завдання створення нових матеріалів і приладів твердотільної електроніки на базі кластерних технологій.

За своєю актуальністю, обсягом проведених досліджень, науковою новизною та практичною значимістю отриманих результатів дисертація повністю відповідає вимогам «Порядку присудження ступеня доктора 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.

Здобувачка Попряга Діана Олександрівна заслуговує на присудження освітньо-наукового ступеня доктора філософії з галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали».

Рецензент

кандидата технічних наук, доцента,  
доцента кафедри інноваційних технологій  
та методики навчання природничих дисциплін  
Держаного закладу

«Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського» Іван ДОНЧЕВ

