

ВІДГУК
офіційного опонента
Балабай Руслани Михайлівни,
доктора фізико-математичних наук, професора,
професора кафедри фізики та методики її навчання
Криворізького державного педагогічного університету
на дисертацію Попряги Діани Олександрівни
«Кластерно-модифіковані гетероструктури з нанокластерною
підсистемою», подану на здобуття наукового ступеня доктора філософії
в галузі знань 10 «Природничі науки»
за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали»

Актуальність дисертації

Авторкою дисертаційного дослідження Діаною Олександрівною Попрягою запропонована ідея управління та контролю за характеристиками речовини на нанорозмірному рівні шляхом формування нанокластерної підсистеми. Такі підсистеми мають вирішальне значення для подолання розриву між окремими атомами та об'ємними матеріалами, демонструючи унікальні фізико-хімічні властивості як єдиного цілого та забезпечуючи розширені функціональні можливості в електроніці, енергетиці, біомедицині тощо. Відтак, тема дослідження є актуальною.

Актуальність дисертаційного дослідження підтверджується також його інтеграцією у планову науково-освітню діяльність Південноукраїнського національного педагогічного університету імені К.Д. Ушинського. Зокрема, щодо розвитку освітніх інноваційних технологій та методики навчання природничих дисциплін за напрямом «Нові комп'ютерні моделі у нанотехнологіях».

У роботі Попряги Діани досліджуються властивості кластеризованих плівкових гетеропереходів (ГП), склад яких формує нанокластерна підсистема (НКП). Метою роботи є вивчення нових закономірностей

формування та фізичних властивостей низьковимірних систем у вигляді нанокластерів та нанокластерної підсистеми твердого тіла. Мету уточнюють і доповнюють сформульовані задачі дослідження, в яких передбачено визначення характеристик нанокластерів та нанокластерної підсистеми твердого тіла, з'ясування механізмів формування нової фази від кластерного до фрактального формату в монофазі на субстратній основі або 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 плівкового ГП з НКП.

Оцінка змісту дисертації та її завершеності в цілому

Дисертаційна робота Попряги Д.О. є кваліфікаційною науковою працею, присвяченою комплексному теоретичному та експериментальному дослідженню властивостей гетеропереходу $p\text{Cu}_2\text{S}-n\text{Si}$ з НКП. Робота має логічну та послідовну структуру, викладена грамотною науковою мовою. Вона складається зі вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків.

У вступі ґрунтується актуальність теми дисертації, формулюються мета і завдання досліджень, наводяться відомості щодо наукової новизни і практичного значення отриманих результатів, а також апробації та публікацій за результатами проведених досліджень.

У першому розділі проведено ґрунтовний аналіз робіт, де показано передумови формування ідеї кластеризації речовини. Ще у 60-их роках Е.Д. Hart, J.W. Voag 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 короткодійчих 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. 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 Гіньє-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 нанокластерної підсистеми речовини 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. 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 дослідях 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.

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 кремнію, 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 фотоперетворювальних елементів. Здобувачкою запропонована технологія отримання такого ГП, що ґрунтується на формуванні НКП. Визначені оптимальні режими роботи фотоелемента на основі гетеропереходу $p\text{Cu}_2\text{S}-(\text{Si}-\text{НКП})-n\text{Si}$. Запропонована технологія виготовлення ГП $p\text{Cu}_2\text{S}-(\text{Si}-\text{НКП})-n\text{Si}$ забезпечує плоский зоно-енергетичний профіль переходу, що відкриває перспективи створення фотоперетворювальних перетворювачів енергії. Зміна структури ГП може відбуватися через процес імплантації кластерного растра острівкової структури на Si підкладку перед напиленням шару Cu_2S . Варіювання швидкості формування НК, температури підкладки, відкриває можливість імплантації НК розміром 10-50 ангстрем. На таких ГП

здобувачкою вперше спостерігалися спектрально-інверсовані фотовентильні ефекти. Діаною Попрягою запропоновані фізичні механізми, що пояснюють цей ефект. Доведено, що при збільшенні розмірів НК до сотні і більше ангстрем фотовентильний ефект не лише не підсилюється, але й навпаки, зовсім зникає, поступаючись іншому ефекту. Показано, що такий ефект на ГП $p\text{Cu}_2\text{S}(\text{НКП})-n\text{Si}$, призводить до підвищення фоточутливості елементів при великих освітленнях.

Дисертація завершується висновками, які повністю відповідають поставленим у роботі завданням, логічно впливають зі змісту розділів та свідчать про досягнення поставленої мети.

Стиль викладання матеріалів дослідження, наукових положень, висновків та рекомендацій дозволяє зрозуміти матеріал дисертації, що свідчить про вміння авторки викладати власні думки. Матеріали дисертаційних досліджень достатньо повно висвітлені у фахових публікаціях авторки: 4 статі у фахових виданнях України (категорія Б), 1 стаття у міжнародному журналі та 2 матеріали тез наукових конференцій.

Наукова новизна та її обґрунтованість

Основні наукові положення дисертаційної роботи, які виносяться на захист, містять наукову новизну, є теоретично обґрунтованими та підтвердженими експериментальними вимірюваннями.

До найбільш значущих результатів належать такі:

- встановлено загальні фізичні закономірності утворення низьковимірних систем у вигляді системи Si-нанокластерів на основі принципів масштабної інваріантності переходу від модельної до реальної у вигляді багаторівневої НКП;
- визначено фізичні властивості гетероструктури на основі Si з НКП;
- розроблено принципи виготовлення гетеропереходу, який включає тонку

плівку $p\text{Cu}_2\text{S}$ на поверхні кластеризованої підкладки кремнію;
- виявлено спектрально-інверсований ефект у ГП $p\text{Cu}_2\text{S}$ -НКП-nSi та аномально високу чутливість фотоелементів на цій основі при надвеликих дозах опромінення фотонами.

Теоретична та практична цінність

Результати, отримані в дисертаційній роботі Попряги Діани, мають цінність як для фундаментальної фізики наносистем, так і для прикладних розробок у сфері нанотехнологій та оптоелектроніки.

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

Практичне значення отриманих результатів полягає у розробці рекомендацій щодо контролю фізичних властивостей і складу твердотільної гетероструктури з нанокластерною підсистемою та технології виготовлення фотопристрою за допомогою операції нанесення на поверхню пластини кремнію кластерного растру субколоїдної дисперсності.

Зауваження та дискусійні питання

Оцінюючи, в цілому, позитивно дисертаційне дослідження Діани Попряги, слід висловити деякі зауваження, що потребують спеціального обговорення в критичній частині відгуку.

1. Окресліть, які методи контролю нанокластерної підсистеми використовувалися саме Вами під час створення гетеропереходу $p\text{Cu}_2\text{S}$ -НКП-nSi?
2. Зазначте, які теоретичні оцінки властивостей нанокластерної підсистеми були здійснені у Вашій роботі?

3. Прокоментуйте фізичні механізми спектрально-інверсованого фотовентильного ефекту, що фіксувався Вами у гетероструктурі $p\text{Cu}_2\text{S}\text{-HKП-nSi}$.

4. У дисертації є граматичні недоліки, мовленнєві огріхи. Наприклад, на сторінці 29 у сусідніх реченнях «... розташований біля поверхні **потенціальної ями**. Однак, рівень ... може існувати, як колективний в ефективній **потенційній ямі**, створеній...» термін «потенціальна яма» написано по різному. Далі, у Переліку скорочень:

Написано: ФЕГ – функціональна електронна густина.

Потрібно: функціонал електронної густини.

Написано: ПФЕГ – параметризована функціональна електронна густина.

Потрібно: параметризований функціонал електронної густини.

Написано: ЛЕЩ – локальна електронна щільність.

Потрібно: локальна електронна густина.

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

Дані про відсутність порушень академічної доброчесності

Аналіз електронної версії дисертації не виявив ознак академічного плагіату, фабрикації, фальсифікації чи інших порушень академічної доброчесності. Текст представлених матеріалів дисертації є оригінальним, всі цитати позначені коректно та правильно відображені в списку літератури.

Використані в роботі теоретичні та експериментальні методи є загальновизнаними в науковій спільноті, їхнє застосування належним чином обґрунтоване та супроводжується посиланнями на відповідні джерела. Отримані результати є логічним продовженням та розвитком існуючих підходів.

Отже, дисертаційну роботу Попряги Діани Олександрівни слід визнати самостійною та оригінальною науковою працею.

Загальний висновок

Дисертаційна робота Попряги Діани «Кластерно-модифіковані гетероструктури з нанокластерною підсистемою» є завершеною науковою працею, в якій вирішено важливу наукову задачу – розроблено теорію нанокластерних підсистем твердого тіла та стимульовано постановку нових експериментів, що будуть спрямовані на вдосконалення технології виготовлення нових приладів на основі нанокластерних підсистем.

Результати дисертації мають важливе теоретичне та практичне значення для прикладної фізики та наноматеріалів. За своєю актуальністю, методологічним рівнем виконання, науковою новизною, обґрунтованістю положень та висновків дисертація відповідає «Вимогам до оформлення дисертації», затверджених наказом МОН України № 40 від 12.01.2017 р. та постанови Кабінету Міністрів України «Про затвердження Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії», № 44 від 12.01.2022 р.

Вважаю, що авторка дисертації, Попряга Діана Олександрівна заслуговує на присудження ступеня доктора філософії в галузі знань 10 «Природничі науки» за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали».

Офіційний опонент:

доктор фізико-математичних наук, професор,
професор кафедри фізики та методики її навчання
Криворізького державного педагогічного
університету



Руслана Балабай