

Відгук офіційного опонента

на дисертацію Микитенко Наталії Олександрівни на тему «Оптимізація фізичних та службових характеристик перовскітних та полімерних трекових наноструктур», представленої на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла

Дисертаційна робота Микитенко Наталії Олександрівни присвячена дослідженню важливих матеріалів сучасної електронної техніки. Але робота містить не тільки результати, що стосуються властивостей конкретних матеріалів (перовскіти та полімерні плівки). В роботі розроблені також методи і підходи, які можуть бути застосовані для покращення параметрів та передбачення властивостей широкого кола матеріалів сучасної електроніки.

Дисертаційна робота побудована згідно існуючих стандартів. Вона складається зі вступу, п'яти розділів, висновків та списку використаних джерел, що складається із 125 найменувань. Повний обсяг роботи становить 119 сторінок друкованого тексту, що містить 7 таблиць та 34 рисунки.

У вступі обґрунтована тематика досліджень, вибір об'єкту та предмету досліджень, обрані методи проведення досліджень. Розглянуті питання наукової новизни та практичного значення одержаних результатів. Наведені дані про апробацію результатів досліджень, особистий внесок автора в одержанні результатів, винесених на захист. Представлена структура дисертації.

У першому розділі представлено огляд літературних даних, що відносяться до теми дисертації. В огляді дається критичний аналіз робіт багатьох авторів, які зробили внесок в у розробку проблем по темі дисертації. Показано, які проблеми потребують подальших досліджень. Таким чином обґрунтований перелік завдань, сформульованих у дисертації.

У другому розділі при дослідженні перовскітних матеріалів розширені можливості методу дескриптора шляхом доповнення стандартної процедури новим методом кореляційної селекції. У роботі запропоновано новий комбінований дескриптор, який включає геометричні параметри (іонні радіуси А і В катіонів), а також енергетичні характеристики (потенціали іонізації А і В катіонів). Дескриптор побудований для відбору перовскітних сполук з високим рівнем іонної провідності.

Було проведено аналіз великої бази даних, що включає 100 перовскітних сполук. У роботі розроблений метод кореляційної селекції матеріалів, який робить більш ефективним метод дескриптора. Метод полягає у тому, що з загального набору значень величин, що розглядаються, шляхом перебору виключаються точки, які погіршують кореляцію. Далі аналізуються характерні особливості виключених сполук для виявлення необхідних змін елементного складу матеріалу, що приведе до покращення його характеристик. Створено комп'ютерну програму для автоматизації метода кореляційної селекції матеріалів. Розроблений підхід матиме широку сферу застосування.

Різноманітні застосування матиме також розроблена автором у третьому розділі дисертації модифікація методу молекулярної динаміки (МД). Розроблену модифікацію класичного метода МД використано для вивчення механізмів радіаційного дефектоутворення при взаємодії іонних пучків з багатоатомними матеріалами та для моделювання проходження іонних потоків через трекові наноструктури. Створено відповідну комп'ютерну програму. Нова модифікація метода МД дозволяє вивчати радіаційні ефекти, що зумовлені певним інтервалом енергетичного спектра інцидентних частинок, тобто окремо надпорогові та підпорогові радіаційні ефекти.

У четвертому розділі модифікований метод МД був застосований для дослідження радіаційно-стимульованих процесів у багатоатомних кристалах, до складу яких входять атоми з масами, що істотно відрізняються. Виявлено формування «важких кластерів» у таких кристалах та вивчені закономірності їх утворення. До таких сполук відноситься багато матеріалів, в тому числі реакторні, полімерні матеріали та ін. У полімерних матеріалах значна різниця в масах атомів вуглецю і водню впливає на радіаційно-стимульовані процеси, і приводить до формування вуглецевих кластерів. Формування важких кластерів в цих матеріалах істотно впливає на їх фізичні та службові характеристики.

У п'ятому розділі досліджується ефект пульсацій іонного струму при проходженні через трекові структури. Створена модель пульсацій іонного струму.

Трекова структура представлена у вигляді двомірної системи токів. Ефект пульсацій іонного струму у літературі пояснюють використовуючи різні моделі. Однак модель, розроблена у дисертації, уперше дозволила одержати добре узгодження практично зі всіма експериментальними даними.

Таким чином, у дисертації одержані принципові результати, що стосуються важливих матеріалів сучасної електронної техніки. Знайдено шляхи одержання перовскітних сполук с високою іонною провідністю. Розроблений підхід носить загальний характер і може бути застосований для покращення характеристик інших матеріалів. Розроблена модифікація методу молекулярної динаміки може мати різні застосування. У дисертації вона використана для дослідження механізмів радіаційного дефектоутворення у багатоатомних матеріалах, в яких маси атомів значно відрізняються. Виявлення створення важких кластерів є окремим важливим результатом, який пояснює формування вуглецевих преципітатів у треках полімерних плівок, але може мати певне значення при розгляданні реакторних та інших матеріалів. Модифікований метод молекулярної динаміки у дисертації застосований при розробці моделі пульсацій іонного струму у треках.

Всі одержані автором результати є достовірними. В роботі застосовані сучасні методи комп'ютерного моделювання структури та властивостей матеріалів, модифікований класичний метод МД, кореляційний аналіз, статистична обробка великих баз даних. Створені відповідні комп'ютерні програми.

Дисертація Н. О. Микитенко є завершеним науковим дослідженням. Результати дисертаційної роботи обговорювались на семінарах і конференціях в Україні і за кордоном. Вони опубліковані у зарубіжних журналах з високим Impact фактором і у вітчизняних фахових виданнях.

Проте є необхідність зробити деякі зауваження. У тексті є погрішності:

1. Сказано, що проаналізовано 100 перовскітних сполук. В тексті приведено тільки 80 (Таблиця 2. 1).

2. На рис. 2. 2 і 2. 3 (стор. 35) значення дескриптора приведені в абсолютних одиницях (не відносних).

3. На рис. 2.4 (стор. 43) підпис повинен бути «алгоритм програми» (не алгоритм роботи методу).

4. На рис. 4. 8 і 4. 9 не зовсім вдалі позначення.

5. На рис. 4. 10 повинно бути позначення «уд./крок» (не «уд./кроки»).

Приведені зауваження не знижують цінності роботи, яка містить результати, що мають принципове і практичне значення для подальшого прогресу сучасної електроніки.

Таким чином можна заключити, що дана робота відповідає вимогам Міністерства освіти і науки України, викладеним в Порядку присудження наукових ступенів, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24.07.2013 № 567, що пред'являються до дисертацій кандидата фізико-математичних наук по спеціальності 01.04.07 – фізика твердого тіла, а її автор заслуговує присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук.

Офіційний опонент

Лауреат Державних премій,
Завідувач кафедри фізики оптичного зв'язку
Одеської національної академії зв'язку ім. О. С. Попова,
Доктор фізико-математичних наук,
Професор

Вікулін І. М.