

ВІДГУК

на дисертацію МИКИТЕНКО Н.О. *«Оптимізація фізичних та службових характеристик перовскітних та полімерних трекових наноструктур»*, подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

Пористі структури в нанорозмірному варіанті в останній час стали об'єктом широкого дослідження багатьох лабораторій завдяки легкості – змінювати їх характеристики. Особливу увагу привертають перовскіти (базовий склад - CaM_xTiO_3) та полімери завдяки їх схильності до наноструктуризації з нанопустотами. Додаткові можливості виникають при формуванні лінійних пустот, т.зв. трекових утворень, що виникають у випадку високоенергетичних опроміненнях іонами важких елементів.

Теоретичний розгляд супроводжувальних процесів при їх формуванні в багатьох аспектах не був виконаний раніше . Саме цьому і присвячена дана дисертаційна робота. що визначає її наукову та прикладну актуальність.

Передусім зауважимо, що розглянуті об'єкти дослідження (зокрема різноманітні перовскітні модифікації з заміною Ca на Sr, супроводжується в нанорозмірній кластерній модифікації численними структурними перетвореннями (орторомбічні, кубічні, тетрагональні), отже, формуванням «треків» з різною конфігурацією їх поверхні, варіацією діаметру, довжини та ін.. Що стосується перовскітів, то вони в даний час розглядаються як альтернативний матеріал для сонячної енергетики майбутнього, газової сенсорики та в інших пристроях високої технології та техніки.

Завдяки складності кристалоструктури (співіснування різних кристаломодифікацій в одному нанокластері) численні теоретичні дослідження даних систем проводиться з використанням складної теоретичної процедури, що, безумовно, сповільнює та здорожує отримання конкретних результатів. Проте існує інший шлях, який дозволяє до певної міри обійти ці складнощі. Отже, автором були розроблені різні наближені підходи розрахунку параметрів з метою отримання оптимальних параметрів матеріалів вказаного типу та

опису їх властивостей використовуючи трекові наноструктури як базові при створенні нових наносенсорів, нанотранзисторів та ін.

Метою даної дисертації була розробка надійних наближених комп'ютерних моделей для розрахунку та вдосконалення властивостей на прикладі перовскітних та полімерних матеріалів.

Відмітимо основні на нашу думку, результати, отримані автором.

1. Були розраховані робочі характеристики декількох актуальних матеріалів (перовскітів та полімерів) шляхом модифікованого методу молекулярної динаміки (МД), кореляційного аналізу та статистичної обробки великих баз даних.

Були створені та проаналізовані бази даних у широкому діапазоні іонної провідності перовскітних матеріалів. Аналіз цих баз даних показав, що для перовскітних наноструктур підвищена чутливість фізичних властивостей до елементного складу, до таких змінних, як чистота матеріалу, число поверхневих і об'ємних дефектів, як розмір зерна.

2. Був сконструйований новий дескриптор, який дозволяє передбачати величину іонної провідності перовскітних сполук в залежності від їх елементного складу. На відміну від відомих, сконструйований дескриптор уперше враховував як геометричні, так і енергетичні характеристики матеріалу, він використовується для передбачення фізичних властивостей, а саме іонної провідності та ін.. Розроблено метод кореляційної селекції матеріалів, який дозволяє удосконалити кореляційний ряд при використанні методу дескриптора.

3. Застосований метод молекулярної динаміки (МД) для моделювання дефектоутворення в полімерних плівках під дією іонних пучків, а також для вивчення процесів проходження іонних струмів через трекові структури. З цією метою розроблено варіант класичного методу молекулярної динаміки, в якій введено так звану «ударну силу», що дозволяє моделювати певні часові залежності енергетичного спектру. Таким чином виникає можливість вивчати роздільно надпорогові та підпорогові радіаційні ефекти.

4. Інша група результатів стосується полімерних плівок. Встановлено, що при іонному бомбардуванні багатоатомних кристалів з атомними масами, що значно відрізняються, виникають так звані «важкі кластери». Це пояснює важливий експериментальний результат, згідно якому при іонному бомбардуванні полімерних плівок з дванадцятикратною різницею атомних мас (вуглецю і водню) виникають вуглецеві фазові преципітати. Досліджені закономірності утворення важких кластерів при іонному бомбардуванні багатоатомних кристалів з атомними масами, що значно відрізняються. Це відкриває шлях для формування певних дефектних кластерів на внутрішніх поверхнях треків, що є важливим при створенні треківих пристроїв.

5. Розроблена модель для дослідження ефектів пульсацій іонного струму при дифузії електроліту через систему треків. Для цього використана розроблена модифікація методу молекулярної динаміки. Результати, отримані на базі розробленої моделі, добре узгоджуються з відомими експериментальними закономірностями. Встановлено, що пульсації іонного струму у треківих приладах є наслідком колективного ефекту взаємодії іонних струмів в окремих треках.

До дисертації є такі зауваження.

1. В зв'язку з тим, що в речовинах перовскітного типу ймовірно виникнення співіснування багатьох істотно різних кристалічних фаз, важливими є ефекти на границях цих фаз, перспективні для сенсорики), як, наприклад, існування заряду на границях та ін. Автор можливий вплив цього фактору не враховує.

2. Розглянуті автором треківі явища, автор, зазвичай, інтерпретує в моделі квазі-рівноважного стану, тоді як іонне треківі технологія є суто нерівноважна.

3. В розглянутих структурах досить ймовірними є товщинні неоднорідності (хімічного складу, механічні напруги і та ін..) вздовж треків. Вплив цих факторів автор не оцінює.

4. При виборі форми потенціалу автор обмежується спрощеними моделями та відомим потенціалом Ленарда-Джонса, хоча ймовірно виникнення

квантоворозмірної ситуації (в надтонких порах) та кулонівської блокади, де форма потенціалу істотно змінюється. Аналіз цих випадків був би корисним.

5. Деякі терміни («токи» замість «струми» , «службові характеристики» замість «робочі характеристики»; «особлива чутливість» - замість вибіркова, «решітка» - замість ґратка), є калькою з російських.

Однак дані зауваження не ставлять під сумнів основні висновки роботи.

Оцінюючи роботу в цілому, можна відмітити, як позитив, детальне порівняння виконаних автором розрахунків з сучасними експериментальними даними, які демонструють гарне співпадіння і цілу низку важливих передбачень.

Результати роботи добре опубліковані у відомих фізичних журналах, та доповідались на численних конференціях відповідного профілю.

Все це свідчить про те, 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 йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук.

ОФІЦІЙНИЙ ОПОНЕНТ

В.Г.ЛИТОВЧЕНКО

Керівник Відділення “Фізика поверхні та мікроелектроніка” Інституту фізики напівпровідників ім. В.Є.Лашкарьова НАНУ
чл.-к. НАН України, д.ф.-м.н., проф.

Підпис В.Г. Литовченка засвідчую.

Вчений секретар
ІФН ім. В.Є.Лашкарьова НАНУ
д.х.н., проф.

В.М.ТОМАШИК