

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

Дончева Івана Івановича

**«Проходження іонних потоків через наноструктури», представлену
на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю
105 «Прикладна фізика та наноматеріали»**

Актуальність теми. Пористі матеріали вивчаються протягом довгого часу. Особливо багато уваги приділяється вивченню цих матеріалів останнім часом, це пов'язано з їх широким застосуванням у біології, медицині, екології. Особливе місце у численних застосуваннях посідають штучні пористі матеріали, зокрема трекові структури. Одне з важливих застосувань трєкових матеріалів полягає у створенні трєкових біосенсорів.

У дисертації, що рецензується, детально вивчені властивості трєкових матеріалів, які важливі для вдосконалення та створення нових біосенсорів. Звідси випливає актуальність дисертаційної роботи.

Структура дисертаційної роботи. Дисертація складається зі вступу, п'яти розділів, висновків, заключення, списку використаних джерел зі 128 найменувань. Робота викладена на 104 сторінках і включає 29 рисунків і 2 таблиці.

Достовірність результатів дисертаційної роботи забезпечена модифікованим методом молекулярної динаміки, комп'ютерним експериментом, який відповідає реальним даним та виступами на міжнародних конференціях.

Наукова новизна одержаних результатів, вперше:

1. Розроблена нова комп'ютерна модель нанотреку, яка дозволяє досліджувати його окремі елементи та механізми проходження іонних потоків через трек. Для цього були розроблені нові алгоритми і комп'ютерні програми.

2. Виявлені закономірності дифузійних процесів у пористих матеріалах, механізм яких визначається взаємодією речовини, що проходить через трек з дефектами внутрішніх поверхонь треків, зокрема з центрами адсорбції.

3. Проведені комп'ютерні експерименти, які дозволили знайти спектр дефектів на внутрішніх поверхнях треків. Розроблені моделі реальної структури треків.

4. Досліджені механізми взаємодії іонів, що проходять через трек, з локальними центрами на внутрішній поверхні треку.

5. Показано можливості ідентифікації різноманітного забруднення середовища за допомогою треківих біосенсорів, використовуючи спрощені характеристики об'єкта (заряд, розмір тощо).

6. Передбачені структурні особливості треків можуть бути використані в різних галузях біології та медицини.

Для того, щоб надати трековій структурі необхідні властивості, потрібно послідовно провести ряд процесів, кожен з яких повинен забезпечити певний результат. Треки створюються у тонких діелектричних плівках в результаті іонної імплантації. Внутрішня поверхня треку має складну дефектну структуру, яка залежить від характеристик іонів, що бомбардують, умов імплантації та ін. Далі проводиться хімічне травлення.

У методі молекулярної динаміки (МД), який був використаний, були зроблені корисні вдосконалення, зокрема розділення енергетичного спектра та аналіз радіаційно-індукованих процесів, що дозволило детальніше дослідити процеси, які відбуваються в трекових структурах, і краще контролювати їхні властивості, що впливає на якість створюваних біосенсорів.

Практичне значення одержаних результатів:

1. Покращення характеристик біосенсорів: Завдяки вдосконаленим методам комп'ютерного моделювання та молекулярної динаміки, досліджено та оптимізовано параметри трекових структур, що використовуються в біосенсорах. Це дозволяє створювати більш чутливі та надійні сенсори для виявлення біозабруднень та інших частинок на рівні мікро- та нанорозмірів.

2. Контроль дефектної структури треків: Отримані результати дали змогу контролювати дефекти в трекових структурах, які впливають на якість матеріалів, що використовуються в сенсорах. Це особливо важливо для створення високоточних приладів в галузях медицини, біології, екології. Застосований модифікований метод молекулярної динаміки може бути використаний для вирішення задач дифузії та міграції наночастинок у пористих структурах. Пояснення причин відхилення від Арреніусівської дифузії у пористих середовищах може бути використане для інтерпретації дифузійних процесів у пористих середовищах різного типу.

3. Виявлення забруднень: Розроблений механізм дозволяє точно виявляти забруднюючі частинки в іонних потоках, що проходять через трек. Це може бути використано в створенні сенсорів для аналізу

чистоти середовищ, зокрема у біомедичних дослідженнях та моніторингу навколишнього середовища.

4. Оптимізація технологічних процесів: Результати роботи дають змогу прогнозувати технологічні умови для виготовлення трекових структур підвищеної якості. Це сприятиме вдосконаленню технологій виробництва матеріалів для сенсорів, що дозволить збільшити їхній експлуатаційний ресурс. Модель трекового біосенсора дозволяє під час створення реального трекового біосенсора оптимізувати параметри трека.

5. Мультидисциплінарне застосування: Одержані результати можуть бути використані не тільки в біосенсорах, але й в інших напрямках, таких як радіаційна фізика, матеріалознавство, а також в медицині, біології та екології. Розроблені комп'ютерні програми можуть бути використані для вирішення широкого кола задач у галузі нанотехнологій.

Отримані в дисертації результати показують способи впливу на протікання рідин через нанотреки, що є важливим для оптимізації функціонування біосенсора.

Встановлено, що дефектна структура стінок треку визначає характер протікання речовини через трек. Комп'ютерне моделювання показало, як передбачити вплив характеристик іонів, що імплантуються, на утворення структурних дефектів уздовж траєкторії швидкого іона. У роботі досліджено вплив локальних центрів на кінетику проходження речовини через нанотрек. Зокрема центри адсорбції на стінках треку істотно впливають на характеристики струму рідини. Тому запропоновано модель центру адсорбції, та

докладно досліджено вплив просторового розташування цих центрів на рух рідини у треку.

У роботі встановлено характерну залежність щільності потоку, що проходить через трек, від діаметра треку. Отриманий результат добре узгоджується з експериментальними даними, отриманими в експериментальній лабораторії.

Показано, що стінки треку мають тришарову структуру. Причому на кінетику потоку впливають усі шари із різною дефектною структурою. Але важливу роль у проходженні речовини через нанотрек відіграє проміжний шар у вигляді «півтіні».

Важливим результатом з погляду створення сенсора виявився вплив сторонніх тіл на кінетику протікання через трек "несучої" рідини. Виявилось, що відмінність лише однієї характеристики чужорідної частинки (наприклад, розмір чи заряд) призводять до своєрідної зміни кінетики струму несучої рідини. Встановлено, що механізм виявлення чужорідної частинки зумовлений виникненням збудженої області в об'ємі потоку, розміри якої залежать у разі від заряду (чи іншої характеристики) чужорідної частинки. Цей результат означає можливість створення більш простого сенсора, порівняно з існуючими.

Таким чином можна зробити висновок, що в дисертаційній роботі отримані результати, що роблять помітний внесок у фізику пористих матеріалів, а також показані нові можливості для вдосконалення сенсорних приладів.

Ці результати отримані завдяки використанню методу комп'ютерного моделювання. Лабораторний експеримент потребує набагато більш тривалих досліджень.

Водночас необхідно зробити по роботі низку зауважень:

1. Не показано, як залежать параметри треку від матеріалу плівки.
2. Не зазначено, які іони використовуються для створення треків.
3. Розглядається лише циліндрична модель треку. А як залежать параметри треку від його форми?
4. Незрозуміло, які локальні центри досліджувалися, крім центрів адсорбції.

Зроблені зауваження не знижують наукову цінність роботи.

Результати роботи є опубліковані у матеріалах міжнародних конференцій та в журналах, що включені у науково-метричну базу SCOPUS, а також є оригінальними та практично важливими. Дисертаційна робота І. І. Дончева відповідає всім вимогам, які пред'являються до дисертацій на здобуття наукового ступеня доктора філософії (PhD) за спеціальністю 105 «Прикладна фізика та наноматеріали», а її автор заслуговує присудження йому цього ступеня.

Офіційний опонент
доктор фізико-математичних наук,
професор, професор кафедри
інформаційних систем та мереж
Національного університету
«Львівська політехніка»



Роман ПЕЛЕЩАК

Підпис засвідчую
Вчений секретар
Національного університету
«Львівська політехніка»,
к.т.н., доцент



Роман БРИЛИНСЬКИЙ