

ЗАТВЕРДЖУЮ

Ректор

Державного закладу
«Південноукраїнський
національний педагогічний
університет імені
К. Д. Ушинського»

Андрій КРАСНОЖОН

«09» серпня 2024 року



ВИСНОВОК

Державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського» з дисертаційної роботи Дончева Івана Івановича на тему «Проходження іонних потоків через наноструктури», на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали.

ВИТЯГ

з протоколу № 1 розширеного засідання кафедри інноваційних технологій та методики навчання природничих дисциплін навчально-наукового інституту природничо-математичних наук, інформатики та менеджменту від 09 серпня 2024 року.

Присутні: зав.каф., к.ф.-м.н., доц. Д. О. Дячок, д.ф.-м.н., проф. А. Ю. Ків, д.т.н., проф. А. О. Брюханов, д.ф.-м.н., проф. В. М. Соловійов, к.п.н., доц. Л. В. Боднар, д.п.н., доц. О. І. Ордановська, к.ф.-м.н., доц. Т. С. Совкова, к.ф.-м.н., доц. Н. А. Волчок, викл. О. Є. Сидоров, викл.-стаж., аспір. І. І. Дончев, лаб. І. І. Філіппович.

Запрошені: д.ф.-м.н., проф. В. В. Усов, д.ф.-м.н., проф. В. М. Пивоварчик, д.ф.-м.н., проф. О. Р. Гохман (гарант ОНП 105), д.ф.-м.н., доц. Н. М. Шкатуляк.

Порядок денний: доповідь аспіранта І. І. Дончева за змістом дисертації на тему «Проходження іонних потоків через наноструктури»; затвердження рекомендацій щодо складу разової СВР.

1. Слухали: аспіранта І. І. Дончева, який наголосив, що його дисертаційна робота присвячена дослідженню процесів проходження іонних потоків через

наноструктури. Проблема має як теоретичне, так і практичне значення. Проходження частинок у пористих речовинах досліджується довгий час, але досі немає уявлень про механізми цих процесів. Цей аспект є необхідним для вирішення практичних задач у біології, медицині та електронній техніці. Було досліджено штучні пористі речовини шляхом комп'ютерного моделювання. Було створено відповідні комп'ютерні програми. Внаслідок проведених досліджень з'явилася змога вивчити закономірності проходження речовин різної природи через трекові структури. Ці результати були націлені на вдосконалення трекових біосенсорів і створення нових приладів. У процесі виконання роботи розроблено моделі різних наноструктур і досліджені їх властивості. Одержані результати опубліковані у 10-ти міжнародних і фахових журналах, серед яких частина індексована в базі даних SCOPUS з високим квантилем.

Зав. каф., к.ф.-м.н., доц. Д. О. Дячок: «Чи є зараз умови для створення прототипу сенсору?»

Дисертант І. І. Дончев: «Такий прототип був створений, але ми працюємо над його покращенням».

Зав. каф., к.ф.-м.н., доц. Д. О. Дячок: «Чи можуть вашими комп'ютерними програмами скористатися дослідники, які вивчають метали?»

Дисертант І. І. Дончев: «Так, моїми комп'ютерними програмами можуть скористатися дослідники, які вивчають метали, але треба мати відповідний потенціал».

К.ф.-м.н., доц. Т. С. Совкова: «Скільки часу займає один комп'ютерний експеримент?»

Дисертант І. І. Дончев: «Один комп'ютерний експеримент займає від декількох годин до декількох днів».

К.ф.-м.н., доц. Т. С. Совкова: «Чи є порівняння з експериментальними результатами?»

Дисертант І. І. Дончев: «Так, є. Порівняння з експериментальними результатами відображені на слайді».

К.ф.-м.н., доц., доц. Н. М. Шкатуляк: «Скільки частинок було розглянуто у ваших моделях?»

Дисертант І. І. Дончев: «Як правило 1000 частинок».

К.ф.-м.н., доц., доц. Н. М. Шкатуляк: «Чи можна Вашу модель центра адсорбції використати для дослідження інших об'єктів?».

Дисертант І. І. Дончев: «Мою модель можна використовувати у всіх задачах де розглядаються адсорбційні процеси».

ОБГОВОРЕННЯ

Зав. каф. інноваційних технологій та методики навчання природничих дисциплін, к.ф.-м.н., доц. Д. О. Дячок: дисертаційна робота аспіранта Івана Дончева виконана в руслі сучасних актуальних задач, пов'язаних з раннім виявленням різного типу забруднень як неорганічних, так і органічних речовин. Головною метою було знайти такі шляхи створення чутливих датчиків, які були б зручними у використанні, достатньо чутливими і, як можна, дешевшими. До таких датчиків належать трекові біосенсиори. Тому важлива задача, по-перше, вивчити структуру трекових матеріалів і, по-друге, вивчити закономірності проходження іонних потоків через ці структури. Дисертант виконав великий об'єм досліджень. Одержані результати вказують шляхи регулювання дефектної структури внутрішніх поверхонь треків. Розвинені нові підходи для моделювання різних процесів, які є важливими для отримання трекових структур високої якості, а також забезпечення необхідних параметрів сенсорних приладів, які можуть бути виготовлені використовуючи одержані результати.

Я вважаю, що представлена робота відповідає сучасним вимогам до дисертації на вчену ступінь доктора філософії і може бути представлена до захисту.

Рецензент к.ф.-м.н., доц. Т. С. Совкова: дисертаційна робота аспіранта Івана Дончева має як теоретичний, так і практичний інтерес. Для того, щоб зробити ефективну модель трекової структури, треба було використати модифіковану версію молекулярної динаміки, яка дозволяла вирішувати два типи задач. Перший тип належить до радіаційно-стимульованих процесів, а другий тип – до процесів хімічної обробки матеріалу. Перший тип був раніше розроблений на кафедрі, а другий тип був розроблений в дисертації, яка рецензується. Алгоритми комп'ютерних програм були модифіковані таким

чином, що потенціали міжатомної взаємодії змінювались у процесі обчислень. У дисертації встановлені закономірності проходження іонних потоків через нанопори. Такі процеси почали вивчатись давно, але до теперішнього часу закономірності такої дифузії не були пояснені. Проведені дослідження дозволили дати рекомендації експериментальній лабораторії для конструювання сенсорних приладів з високою чутливістю і роздільною здатністю.

Я вважаю, що робота заслуговує представлення до захисту на ступінь доктора філософії.

Рецензент к.ф.-м.н., доц. кафедри прикладної математики та інформатики Н. М. Шкатуляк: дисертаційна робота аспіранта Івана Дончева присвячена дослідженням трекових структур, які у цей час використовуються у біології, медицині та техніці. Дисертант вирішував дві групи задач: перша група задач стосується моделювання реального треку і підвищення його структури; друга група задач пов'язана з проходженням різних речовин через треки.

В процесі виконання роботи дисертант використав розроблені ним моделі різних дефектних структур, розробив нові підходи та розвинув інші підходи, які були запропоновані на кафедрі раніше. У результаті виконання дисертаційної роботи були запропоновані способи отримання необхідних параметрів для забезпечення високої якості сенсорного приладу. Робота проводилась у кооперації з експериментальною лабораторією Інституту фізики Словацької академії наук. Таким чином, результати дисертації одержали практичну реалізацію.

Я вважаю, що робота може бути представлена до захисту.

Науковий керівник, д.ф.-м.н., проф. А. Ю. Ків: дисертаційна робота аспіранта Івана Дончева відрізняється тим, що вона вирішує як теоретичні завдання фізики твердого тіла, так і практичні завдання покращення якості біосенсорів. Робота виконувалась в тісній взаємодії з експериментальними зарубіжними лабораторіями. В процесі виконання роботи були внесені вдосконалення в класичну молекулярну динаміку і створені оригінальні комп'ютерні моделі сучасних біосенсорів. Таким чином, робота може бути представлена до захисту.

2. Слухали: зав. каф., к.ф.-м.н., доц. Д. О. Дячка: пропоную наступний склад разової СБР для проведення захисту дисертації на здобуття наукового ступеня доктора філософії (105 Прикладна фізика та наноматеріали) аспіранта Університету Ушинського Дончева Івана Івановича з теми «Проходження іонних потоків через наноструктури»:

- Голова ради: доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри технологічної та професійної освіти В. В. Усов;
- Рецензенти: доктор технічних наук, професор кафедри інноваційних технологій та методики навчання природничих дисциплін А. О. Брюханов, доктор фізико-математичних наук, професор кафедри прикладної математики та інформатики О. Р. Гохман;
- Опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор, декан факультету математики, фізики та інформаційних технологій Одеського національного університету імені І. І. Мечникова Ю. А. Ніцук, доктор фізико-математичних наук, професор, професор кафедри інформаційних систем та мереж Національного університету "Львівська політехніка" Р. М. Пелещак.

Ухвалили: у результаті обговорення дисертаційного дослідження Дончева Івана Івановича на тему «Проходження іонних потоків через наноструктури», кафедрою інноваційних технологій та методики навчання природничих дисциплін Державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського» затвердити рішення:

Рекомендувати вченій раді університету Ушинського затвердити склад запропонованої разової СБР і представити дисертаційну роботу здобувача І. І. Дончева з теми: «Проходження іонних потоків через наноструктури» до захисту.

Актуальність теми. Пористі матеріали останнім часом набули широкого поширення для вирішення багатьох завдань у галузі нанотехнологій, біології та медицини. Серед цих матеріалів важливе місце займають штучні, зокрема, трекові пористі матеріали. Ці останні матеріали стали основою для створення трекових біосенсорів.

Винахідники біосенсорів продовжують пропонувати рішення для контролювання різноманітних процесів у різних сферах застосування. Розробка біосенсорів ґрунтується на вимогах їх чутливості, специфічності, економічності та здатності виявляти невеликі кількості речовини.

Останнім часом набули застосування так звані трекові біосенсиори. Тонкі полімерні фольги з іонними треками використовуються як основа для побудови трекових біосенсорів високої якості. Але існує необхідність високоточної підготовки пор для реєстрації дуже низьких струмів, які потрібно аналізувати.

Наукова новизна одержаних результатів:

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 і дано пояснення відповідним механізмам.

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 ідентифікувати різноманітні забруднення середовища за допомогою трекових біосенсорів, використовуючи спрощені характеристики об'єкта (заряд, розмір тощо).

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

Практичне значення одержаних результатів:

1. Розроблені комп'ютерні програми можуть бути використані для вирішення широкого кола задач у галузі нанотехнологій.

2. Застосований модифікований метод молекулярної динаміки може бути використаний для вирішення задач дифузії та міграції наночастинок у пористих структурах.

3. Модель трекового біосенсора дозволяє під час створення реального трекового біосенсора оптимізувати параметри трека.

4. Розроблена модель треку дозволяє оптимізувати також інші штучні пористі структури, що застосовуються у медицині, біології та екології.

5. Запропоновані моделі адсорбційних центрів можуть бути застосовані для вдосконалення інших приладів, у яких є суттєвими процеси адсорбції.

6. Пояснення причин відхилення від Арреніусівської дифузії у пористих середовищах може бути використане для інтерпретації дифузійних процесів у пористих середовищах різного типу.

7. Дослідження дефектної структури внутрішньої поверхні треків дозволяють використовувати результати при інтерпретації ефектів іонної імплантації.

8. Результати дослідження проходження іонних потоків через треки дозволяють пропонувати вдосконалені варіанти треків біосенсорів.

Надійність та вірогідність результатів: визначається використанням сучасних комп'ютерних методів моделювання мікропроцесів, порівнянням результатів з опублікованими роботами відповідної тематики, а також порівнянням із експериментальними результатами, які одержані в лабораторіях з якими співпрацює кафедра.

Відомості про повноту надрукованих результатів автора:

Список публікацій здобувача за темою дисертації:

1. Ion-induced n-p inversion of conductivity in TiNiSn compound for thermoelectric applications. / K. Kirievsky et al. *Journal of Applied Physics*. 2019. Vol. 126 (15), Q1.

URL: <https://pubs.aip.org/aip/jap/article-abstract/126/15/155106/1062243/Ion-induced-n-p-inversion-of-conductivity-in?redirectedFrom=fulltext>

DOI: <https://doi.org/10.1063/1.5121825>

2. Simulation of the Passage of Ion Flows Through Nanotracks. / Y. Bondaruk et al. *International Journal of Advanced Computer Technology*. 2020, Vol. 9, № 2, P.1-4, Q1.

URL: <https://ijact.org/index.php/ijact/issue/view/46>

DOI: <https://doi.org/10.18535>

3. Computer model of track biosensor. / I. Donchev et al. *Semicond. Phys. Quant. Electron. Optoelectron.* 2022. Vol. 25. № 4. P.441-445. (Scopus, WoS, SJR = 0.19, Q3 – Electrical and Electronic Engineering; Open Access).

URL: http://journal-spqeo.org.ua/n4_2022/v25n4-p441-445.pdf

DOI: <https://doi.org/10.15407/spqeo25.04.441>

4. Optimization of ion track characteristics in a track biosensor. / I. Donchev et al. *Acta Carpathica* (категорія «Б»). 2022. Vol. 2(38). P.31-37.

URL: <http://journals.dspu.in.ua/index.php/actacarpathica/article/view/448>

DOI <https://doi.org/10.32782/2450-8640.2022.2.4>

5. Computer modeling of biological contaminants in a track biosensor. / I. Donchev et al. *Acta Carpathica* (категорія «Б»). 2022. V.1(37), P.5-13.

URL: <http://journals.dspu.in.ua/index.php/actacarpathica/article/view/311>

DOI <https://doi.org/10.32782/2450-8640.2022.1.1>

6. Simulation of track structures as the basis of biosensors. / I. Donchev et al. *Acta Carpathica* (категорія «Б»). 2023. Vol.1(39). P.66-72.

URL: <http://journals.dspu.in.ua/index.php/actacarpathica/article/view/482>

DOI <https://doi.org/10.32782/2450-8640.2023.1.8>

7. Features of chemical etching of track structures. / A. Vinkovskaya et al. *Acta Carpathica* (категорія «Б»). 2023, Vol. 2(40).

URL: <http://journals.dspu.in.ua/index.php/actacarpathica/article/view/524>

DOI: <https://doi.org/10.32782/2450-8640.2023.2.12.8>.

8. Ion Track Etching Revisited: Influence of Aging on Parameters of Irradiated Polymers as Required for Advanced Device. / Y. Bondaruk et al. *Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop on Advanced Nanomaterials for Detection of CBRN*. Odessa, Ukraine. 2–6 October. 2019. P149-170.

URL: <https://dokumen.pub/advanced-nanomaterials-for-detection-of-cbrn-1sted-9789402420296-9789402420302.html>

9. Improvement of ABO₃ perovskites through the correlation selection. / A. Kiv et al. 8-ма Українська наукова конференція з фізики напівпровідників. 2–4 жовтня 2018 р. Ужгород: ТОВ «Рік-У», 2018. С. 487-489.

URL:https://drive.google.com/file/d/1bZF1zMDAhA_DtIofFq_6CyPmWx7TiCJe/view

10. Network properties of polymer matrixes for controlling a functionality of amperometric biosensors: recent advances and perspectives / T. Kavetsky et al. 11th international congress on microscopy & spectroscopy, Biomatsen 2024. Mugla / Turkey, 18-24 April 2024.

Апробація результатів дослідження: основні положення дисертаційної роботи опубліковано в 10 наукових працях, у тому числі в реферованих наукових журналах опубліковано 7 статей, 3 з яких у виданнях, які індексуються базою даних Scopus та Web of Science, 4 у фахових виданнях, Результати дисертації висвітлено в 3 тезах і матеріалах міжнародних наукових конференціях НАТО та семінарів.

Дисертаційна робота Дончева Івана Івановича на тему «Проходження іонних потоків через наноструктури» відповідає чинним вимогам до дисертацій і може бути рекомендована до захисту на здобуття її автором наукового ступеня доктора філософії зі спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали.

Результати голосування: рекомендувати роботу Дончева Івана Івановича на тему «Проходження іонних потоків через наноструктури» до подачі в спеціалізовану вчену раду із захисту дисертацій на здобуття її автором наукового ступеня доктора філософії зі спеціальності 105 Прикладна фізика та наноматеріали: «за» - 13 ; «проти» - немає; «утримався» - немає. Рішення прийнято одностайно.

Рецензенти:

Кандидат фізико-математичних наук, доцент



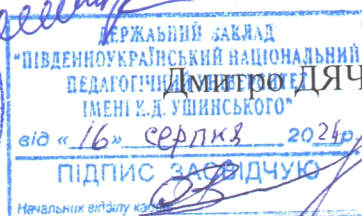
Тетяна СОВКОВА

Кандидат фізико-математичних наук, доцент
кафедри прикладної математики та інформатики



Наталія ШКАТУЛЯК

Головуючий на розширеному засіданні кафедри
(завідувач кафедри,
кандидат фізико-математичних наук,
доцент)



Дмитро ДЯЧОК