



ВІДГУК

офіційного опонента, доктора фізико-математичних наук,
професора **Птащенка Олександра Олександровича**
на дисертаційну роботу
Кравцової Дар'ї Юрївни
**«Електронна структура та фізико-хімічні властивості
мета- і наноматеріалів»**,

подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук
за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла

Завдяки своїм унікальним фізико-хімічним властивостям нано- і метаматеріали перспективні для широкого застосування в багатьох галузях науки і техніки. Нанорозмірні частинки можуть служити каталізаторами хімічних реакцій, активними адсорбентами, носіями розчинених речовин, компонентами, які змінюють механічні, теплофізичні та оптичні властивості матеріалів. Метаматеріали можуть мати такі фізичні характеристики, які неможливі для інших матеріалів. Серед них активно досліджуються і використовуються фотонні кристали, острівцеві плівки, наноккомпозити, надтонкі плівки та нанокластери, які ізольовані або впорядковані як формуючі елементи метаматеріалів. Важливим етапом у дослідженні та створенні нових нано- та метаматеріалів є їх математичне моделювання та конструювання. Мале число атомів у нанокластерах як елементах вказаних матеріалів полегшує їх теоретичне дослідження, що використовує розрахунки з перших принципів із використанням методу функціоналу електронної густини. Це обумовлює актуальність дисертаційної роботи Кравцової Д. Ю. Дисертаційна робота є частиною ряду держбюджетних тем, які виконувалися при ДВНЗ «Криворізькій державній педагогічній університет» за підтримки Державного фонду фундаментальних досліджень.

В дисертації Д. Ю. Кравцової узагальнено результати теоретичного дослідження закономірностей впливу електронної структури цілої низки мета- і наноматеріалів на їх фізико-хімічні властивості. Розрахунки виконано методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів. Досліджено оптичні властивості фотонних кристалів, що складаються із волокон пористого GaAs, волокон графен-SiO₂, наночастинок TiO₂; електронні властивості острівцевих наноплівочок Cu, Ni, Pt, NiFe; енергетичні характеристики формування наноплівочок GaN та AlGaN; каталітичні властивості нанокластерів перехідних металів Cu, Ni, Co, їх оксидів і силіцидів; механічні властивості нанокластерів алмазу, кубічного BN та їх композитів.

Дисертаційна робота викладена на 152 сторінках машинописного тексту, складається зі вступу, трьох розділів, загальних висновків, списку використаних джерел та одного додатку. Список використаних джерел містить 120 найменувань.

Важливими новими результатами роботи є такі:

- а) розраховано величини макроскопічної діелектричної проникності та положення смуги поглинання фотонних кристалів, які складаються із волокон графен-SiO₂ та із наночастинок TiO₂, при різних напрямках електричного вектора електромагнітної хвилі, причому встановлено різку анізотропію вказаних параметрів;
- б) встановлено залежність ширини забороненої зони металевих острівцевих наноплівочок, що складаються із масивів острівців Ni, Cu, Ni_{0.8}Fe_{0.2}, від відстані між ними;
- в) показано, що заміщення атомів Ga на атоми Al і навпаки в плівках AlGaIn є безбар'єрним, і таким чином пояснено неконтрольованість процесу утворення твердого розчину AlGaIn;
- г) встановлено, що певне просторове положення атомів у малих кластерах нанокаталізаторів на основі Cu, Ni, Co, а також додавання атомів Si веде до значного наближення високоенергетичних *d*-станів Cu, Co, Ni до їх *4s*-станів, чим підвищується каталітична активність вказаних кластерів.

Зроблені автором висновки обґрунтовані та відповідають поставленій меті роботи та її змісту. Достовірність результатів дисертації підтверджується використанням сучасних апробованих методів розрахунків, аналізом та мінімізацією похибок всіх розрахунків, а також зіставленням результатів деяких розрахунків з літературними даними.

Результати дисертації апробовані на 7 міжнародних науково-практичних конференціях.

Отримані автором результати мають значну практичну цінність. Вони можуть бути використані для створення нових нано- і метаматеріалів із наперед заданими характеристиками, а також для підвищення робочих параметрів існуючих елементів наноелектроніки.

Аналіз тексту дисертації свідчить про вирішальний особистий внесок здобувача у аналізі літературних джерел, виконанні основного обсягу розрахункових досліджень, обробці та аналізі отриманих даних та написанні статей і дисертації.

Зміст автореферату відповідає основним положенням, наведеним у дисертаційній роботі. Результати дисертаційної роботи відповідають змісту статей, що надруковані у фахових журналах.

Дисертація не позбавлена деяких недоліків. До змісту та оформлення дисертаційної роботи Кравцової Д. Ю. є кілька пропозицій та зауважень.

1. Велике розмаїття структур і явищ, досліджених в дисертації, ускладнює цілісне сприйняття її результатів.
2. Формулювання одного з нових положень роботи «...кількісно визначена чутливість до напрямку збурюючого електромагнітного поля фотонних кристалів» не зовсім чітко відображає відповідні результати дисертації. Замість виразу «напрямок... електромагнітного поля», який не має фізичного змісту, у переліку нових положень і в тексті (на стор. 72) краще було б використати термін «напрямок електричного вектора». Крім того, не зовсім

коректно використано термін «чутливість», коли річ іде про анізотропію оптичних властивостей фотонних кристалів.

3. У підрозділі 3.1.2. наводяться результати, які свідчать про немонотонність залежності макроскопічної діелектричної проникності фотонних кристалів, складених із волокон графен-SiO₂, та положення їх смуги поглинання від кута між електричним вектором і віссю нановолокна. Цікаво було б проаналізувати (і дослідити?) фізичну причину цього явища.

4. Із тексту підрозділу 3.2 випливає, що автором встановлено, а не тільки «проаналізовано» залежність ширини забороненої зони металевих острівцевих плівок від відстані між ними.

5. У формулюванні наукової новизни отриманих результатів автор вказує, що «обґрунтовано керування організацією електронних станів нанокаталізаторів...», але не вказує на механізм цього керування, хоча у відповідному місці дисертації цей механізм описано.

6. Кілька запитань виникає при ознайомленні з підрозділом 3.3, присвяченим епітаксialьному нарощуванню плівки AlGa_N на GaN: а) чому автор вивчає рух атома Al до поверхні (0001) – Ga, а не до (000 $\bar{1}$) – N; б) чому автор обирає як вірогідну траєкторію 1, яка відповідає зіткненню «лоб в лоб» атома Al з поверхневим атомом Ga? Очевидно, що на цій траєкторії енергія зростала б ще в кілька разів, якби атом не був «зупинений» автором на деякій відстані від поверхні; в) на обраних ділянках траєкторій атома Al на нього діють лише сили відштовхування (див. рис. 3.38). А як же відбувається нарощування плівки – це питання залишається поза увагою автора.

7. У дисертації наявні деякі орфографічні, граматичні та стилістичні огріхи.

Дисертаційна робота Кравцової Д. Ю. «Електронна структура та фізико-хімічні властивості мета- і наноматеріалів» є закінченою кваліфікаційною працею, що відповідає п. 9, 11 «Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24 липня 2013 р. № 567. Вважаю, що Кравцова Дар'я Юріївна заслуговує надання їй наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук із спеціальності 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Професор кафедри експериментальної фізики Одеського національного університету імені І. І. Мечникова, доктор фізико-математичних наук, професор



Птащенко О. О.

