

ВІДГУК

офіційного опонента про дисертаційну роботу

Здешиц Анастасії Валеріївни

«Електронні властивості гібридних наноструктур»,

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

Розробка і оптимізація перспективних прототипів органічних напівпровідників для застосування в високопродуктивних пристроях залишаються проблемою. Зокрема, стає все складніше надавати відповідні властивості окремих матеріалів і реалізовувати відповідні фізичні розміри для задоволення зростаючих вимог багатofункціональності для фундаментальних досліджень, проектування пристроїв і оптимізації продуктивності. Такі проблеми можуть бути вирішені шляхом виконання багатовимірної інтеграції або гібридизації органічних напівпровідників з різними типами матеріалів, що володіють потенційно новими функціональними можливостями і унікальними властивості. Двовимірні матеріали Ван-дер-Ваальса є найбільш очевидним кандидатом для такої гібридизації з органічними напівпровідниками. Двовимірна структура має низку виняткових електричних, оптичних, механічних і термічних властивостей у порівнянні з відповідним об'ємним аналогом. 2D/органічна гібридна гетероструктура зазвичай демонструє поліпшені електричні та оптичні характеристики в порівнянні з гетероструктурами, що складаються тільки з органічних або неорганічних матеріалів. Дисертацію присвячено вивченню електронних властивостей актуальних гібридних наноструктур, що складені з волокон поліпарафенілену, плівок Si та вуглецевих нанотрубок; графену, целюлози, кластерів міді та плівок ZnO і пошуку чинників впливу на них. Тому завдання створення адекватних атомних моделей та теоретичне дослідження електронної структури гібридних наноструктур є актуальною задачею фізики наносистем для створення нового класу приладів.

Також про актуальність тематики дисертаційного дослідження свідчить її зв'язок з державною науковою програмою «Визначення просторової будови та електронних властивостей нанорозмірних твердотільних функціональних структур» (№ д/р 0114U003454), «Дослідження оптимальних умов проходження електромагнітних сигналів через метаструктуру із фотонною щільною у повно-оптичному логічному пристрої» (№ д/р 0117U007110, № д/р 01187U000970), а обрані методи на основі функціонала електронної густини Кона-Шема достатньо плідними та ефективними.

За своєю структурою дисертаційна робота Здешиц А. В. складається зі вступу, трьох розділів, висновків і списку використаних джерел.

Перший розділ присвячено літературному аналізу існуючих відомостей про фізичні та електронні характеристики таких компонентів гібридних наноструктур, як: графен, оксид графена, вуглецеві нанотрубки, ZnO, гафеноподібний ZnO, поліпарафенілен та нанокристалічна целюлоза. Зроблено висновок про те, що окремо взяті компоненти гібридної структури

самі по собі демонструють унікальні фізичні властивості. Це відкриває можливість створювати на їх основі нові багатофункціональні електронні пристрої з винятковими механічними, електричними та оптичними параметрами, а також стійкістю, біосумісністю, екологічністю і низькою токсичністю, і тому дослідження зазначених вище гібридних наноструктур представляє теоретичний і практичний інтерес.

У **другому розділі** описана методика розрахунків. На початку розділу зроблено коротке порівняння найбільш поширених у фізиці твердого тіла розрахункових методів і показано, що для поставлених задач розрахунки на основі теорії функціоналу електронної густини є оптимальними за співвідношенням “рівень точності — кількість атомів в системі”. Далі описано алгоритми розрахунків, які використані в роботі. Для найбільш важливих алгоритмів наведено блок-схеми. Методика дослідження, яка використана в роботі, базується на формалізмі псевдопотенціалу, теорії функціоналу електронної густини та наближенні локальної густини. Також проаналізований порівняльний аналіз контрольного компоненту нанокристалічної целюлози з іншими теоретичними розрахунками.

У **третьому розділі** представлено результати розрахунків електронної структури досліджуваних об’єктів, складених з волокон поліпарафенілену, плівок Si та вуглецевих нанотрубок; з графену, оксиду графену та плівок ZnO; з волокон нанокристалічної целюлози, нанокластерів Cu, графену та графеноподібного ZnO, які є основними компонентами для сучасної електроніки.

На основі аналізу розподілів просторової густини валентних електронів та їх спектрів визначено ширини забороненої зони та потенціальні рельєфи гібридних наноструктур, що склалися з волокон поліпарафенілену, плівок Si та вуглецевих нанотрубок. Досить велика заборонена зона (0,082 eV) у наноструктурі тільки з вуглецевих нанотрубок, що були затиснуті між плівками кремнію, зменшувалася, при її доповненні волокном поліпарафенілену, до значення 0,012 eV, при цьому у структурі формувалися значні стрибки у потенціальних рельєфах. Встановлена залежність ширини забороненої зони, розподілу кулонівського потенціалу та повної енергії гібридних наноструктур, що склалися з графену, оксиду графену та плівок ZnO, від геометрії взаємного розташування компонентів. Ширина забороненої зони структур із графену або оксиду графену та фрагментів бішарової плівки ZnO чутлива до орієнтації ZnO як відносно площини графену, так і оксиду графену, – при певному розташуванні компонентів структури заборонена зона зникає. Гібридні структури із графену та ZnO більш енергетично вигідно формувати кисневою атомною площиною ZnO до графену. Розраховані ширини забороненої та валентної зон, значення електричних зарядів в околі остовів атомів наноцелюлози в композитах. Ширини забороненої зони наноцелюлози зменшується майже в 2 рази при будь-якому доповненні до неї інших матеріалів: площини графену, нанокластерів міді. При механічному стисканні композиту валентна зона зменшується. Зміна величини забороненої зони таких композитів при

стисненні має немонотонний характер із екстремумом типу мінімум. Тобто, встановлено, що електронними властивостями композитних структур на основі целюлози можна керувати, наприклад, зміною відстані між шарами складових композиту, що відбувається при механічному стисненні. Вивчено зміни ширини забороненої зони, ширини валентної зони для композитних структур на основі нанокристалічної целюлози та графеноподібного ZnO при механічних впливах. Виявлено, що ширина забороненої зони композиту при механічному стисканні має тенденцію до зменшення. Зафіксовано значний перенос заряду в межах композиту, що приводить до виникнення областей просторового заряду різних знаків. Визначено, що при розрахункових оцінках електронних властивостей органічно-неорганічних гібридних композитів важливим є врахування кулонівських та обмінно-кореляційних взаємодій валентних електронів.

Обґрунтованість та достовірність одержаних результатів забезпечується достатнім рівнем адекватності розроблених теоретичних моделей реальним об'єктам, застосуванням перевірених і широко апробованих методів обчислення спектральних і електронних властивостей гібридних наноструктур, обґрунтованим вибором чисельних наближень і узгодженням обчислених фізичних характеристик із експериментальними і теоретичними даними інших авторів.

Наукова новизна одержаних результатів.

У роботі вперше:

- визначено, що заборонена зона (0,082 eV) у наноструктурі, яка складена тільки з вуглецевих нанотрубок, розміщеними між плівками кремнію, зменшується до значення 0,012 eV при її доповненні волокном поліпарафенілену, при цьому у структурі формуються значні потенціальні бар'єри;

- встановлено, що заборонена зона структур із графену або оксиду графену та фрагментів бішарової плівки при певному розташуванні компонентів структури зникає. Гібридні структури із графену та ZnO більш енергетично вигідно формувати кисневою атомною площиною ZnO, поверненою до графену;

- розраховані заряди на атомах вуглецю, водню та кисню нанокристалічної целюлози, та відзначено, що вони зменшуються при включенні її в композит та механічному стисканні. Ширини забороненої зони наноцелюлози зменшується майже в 2 рази при доповненні до неї інших структурних матеріалів: площини графену, нанокластерів міді;

- досліджено зміну ширини забороненої зони структур на основі нанокристалічної целюлози та графеноподібного ZnO, яка при механічних стисканні зменшується. Зафіксовано значний перенос заряду в межах композиту, що приводить до виникнення областей просторового заряду різних знаків.

Наукове та практичне значення отриманих результатів полягає в розробці рекомендацій при виготовленні тонкоплівкових структур ZnO/Gr/ZnO, тобто оптимізації розташування компонентів у внутрішній

архітектурі гібриду та виготовленні механічних сенсорів на основі кристалічної наноцелюлози. Встановлено, що електронні властивості гібридних композитних структур на основі нанокристалічної целюлози та графеноподібного оксиду цинку або графену можна контролювати шляхом зміни відстані між шарами складових компонентів композиту, що відбуваються під час механічного стискання.

Зауваження до дисертаційної роботи та автореферату.

1. Не зрозуміло, як отримували значення заборонених зон для таких складних гібридних структур.

2. Чим керувалися при виборі обраної кількості ітерацій само узгодження розв'язку рівнянь Кона-Шема.

3. Відсутнє порівняння отриманих результатів електронних властивостей гібридних структур з результатами інших теоретичних досліджень обраних структур.

4. Було б доречно провести особистий експеримент з реальними структурами.

Зазначені зауваження не є принциповими і не знижують наукову та практичну цінність результатів та висновків дисертаційної роботи.

Дисертація Здешиц А.В. є завершеним науковим дослідженням. Автореферат та опубліковані статті повністю відображають зміст дисертації. Автором досліджено широкий спектр гібридних наноструктур й отримано значну кількість результатів, які задовольняють критеріям наукової новизни, достовірності та практичної значущості. Результати роботи є необхідними і своєчасними та відповідають концептуальним цілям розвитку напрямків фундаментальних і практико-орієнтованих фундаментальних досліджень наноматеріалів. Робота має завершений характер і структурну логіку.

Вважаю, що за актуальністю теми, обсягом, науковою новизною, практичною цінністю отриманих результатів і висновків дисертаційна робота «Електронні властивості гібридних наноструктур» повністю відповідає вимогам Департаменту атестації кадрів Міністерства освіти і науки України, які висуваються до кандидатських дисертацій зі спеціальності 01.04.07 — фізика твердого тіла, а її автор, **Здешиц Анастасія Валеріївна** заслуговує на присудження їй наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 — фізика твердого тіла.

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



Ю. А. Нічук

