

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

В останні роки наноструктурні матеріали та нанокompозити, які включають в себе органічні та неорганічні компоненти, набувають все більшого значення завдяки своїм властивостям та постійно зростаючим можливостям для практичного застосування. Процес створення виробів із таких складних за своєю структурою матеріалів, вимагає проведення попереднього теоретичного аналізу та прогнозування їх фізико – хімічних властивостей, в тому числі із перших принципів. В дисертації Здешиц А. В. успішно реалізується цей етап дослідження гібридних наноструктур різної розмірності та хімічного складу. Поставлені в дисертаційній роботі завдання створення адекватних атомних моделей та числовий аналіз електронних властивостей гібридних наноструктур, що утворені із волокон поліпарафенілену, плівок Si та вуглецевих нанотрубок; графену, целюлози, кластерів міді та плівок ZnO беззаперечно є **актуальними та науково обґрунтованими**, а обрані методи аналізу на основі функціонала електронної густини Кона-Шема достатньо ефективними.

Дисертаційна робота Здешиц А.В. добре структурована, написана чіткою і зрозумілою мовою. **За своєю структурою** дисертаційна робота Здешиц А. В. складається зі вступу, в якому визначені мета та задачі роботи, необхідність якої добре обґрунтована, трьох розділів, загальних висновків та переліку використаних літературних джерел із 135 найменувань. Загальний обсяг дисертації складає 140 сторінок, робота містить 47 рисунків та 17 таблиць.

Текст автореферату у повному обсязі відображає основні результати дисертаційної роботи, а також висновки до неї.

Дисертація виконана у рамках держбюджетної теми «Визначення просторової будови та електронних властивостей нанорозмірних твердотільних функціональних структур» (№ д/р 0114U003454) при Криворізькому педагогічному інституті ДВНЗ «Криворізький національний університет», а також за підтримки Державного фонду фундаментальних досліджень у рамках науково-дослідної роботи «Дослідження оптимальних умов проходження електромагнітних сигналів через метаструктуру із фотонною щільною у повно-оптичному логічному пристрої» (№ д/р 0117U007110, № д/р 01187U000970), що виконувалася при ДВНЗ «Криворізький державний педагогічний університет».

У **вступному розділі** обґрунтовується актуальність теми дисертації, формулюються мета і завдання досліджень, наводяться відомості щодо наукової новизни і практичного значення отриманих результатів, а також особистого внеску здобувача, апробації та публікацій за результатами проведених досліджень.

У **першому розділі**, на основі огляду літератури, розглянуті характеристики компонентів гібридних наноструктур. Показано, що властивості графена, оксида графена та вуглецевих нанотрубок вже широко використовуються в промисловості та науці при виготовленні сенсорів, датчиків, електродів тощо. Розглянуті, також, характеристики інших компонентів гібридних наноструктур, а саме, полімерів поліпарафенілена та нанокристалічної целюлози. Наноцелюлозні матеріали після додавання електропровідних добавок, відіграють важливу роль в електроніці як основний компонент, який визначає механічні та оптичні властивості. На цих підкладках інтегровані різні електронні пристрої, включаючи сонячні елементи великої площі, транзистори, органічні світлодіоди, антени та сенсорні екрани. Крім цього, у першому розділі розглянуто характеристики ще одного компонента гібридних наноструктур, а саме, ZnO. Оксид цинку ZnO та його модифікації стає ключовим технологічним матеріалом, який може бути гнучким, має як напівпровідникові, так і п'єзоелектричні властивості. Показано, що коли товщина ZnO порядку декількох атомів, його структура вюрцити може перетворитися на 2D стабільну моношарову структуру, подібну до графену, і модифікація його структури шляхом легування приводить до зміни його електричних властивостей.

Отже, представлений у першому розділі дисертації аналіз доводить, що в матеріалознавстві спостерігається тенденція до створення "гібридів" – матеріалів, що складаються з декількох, часто абсолютно різнорідних компонентів, які дають комбінацію потрібних властивостей у новому створеному матеріалі. Важливу роль при цьому відіграє не тільки хімічний склад окремих компонентів, але і їх атомна структура та взаємне розташування, тобто внутрішня архітектура гібриду. Зміна цієї архітектури дає можливість керувати електронними властивостями отриманого матеріалу, а різноманіття можливих геометрій відкриває цілий спектр, можливих, додаткових властивостей. Отже, дослідження зазначених вище гібридних наноструктур представляє теоретичний і практичний інтерес.

У **другому розділі** описано методику розрахунків на підставі методів псевдопотенціалу та функціоналу електронної густини, починаючи від теоретичних положень і закінчуючи конкретними алгоритмами та описом їх втілення у програмному коді. Подано розрахункові вирази для різних фізичних величин. Наведено алгоритм визначення основних станів електронної системи гібридних структур за допомогою самоузгодженого розв'язку рівнянь Кона-Шема, застосованого у дисертаційному дослідженні. Зроблено оцінку достовірності обчислень авторським програмним засобом шляхом виконання контрольних розрахунків розподілу електронної густини та зарядів на іонних остовах атомів волокна наноцелюлози.

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, що склалися з волокон нанокристалічної целюлози, нанокластерів Cu та графену під впливом механічного стискання та розтягнення. Заряди на атомах вуглецю, водню та кисню нанокристалічної целюлози зменшувалися при включенні її в композит та механічному стисканні. 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. Визначено, що при розрахункових оцінках електронних властивостей органічно-неорганічних гібридних композитів важливим є врахування кулонівських та обмінно-кореляційних взаємодій валентних електронів.

Оригінальні розділи дисертації другий та третій завершуються формулюванням загальних висновків, в яких підсумовано основні результати роботи.

У розділі **Література** наведений перелік літературних джерел. В цілому, обсяг у 135 посилань адекватно відображає сферу досліджень електронних властивостей гібридних наноструктур, якій присвячено дисертаційну роботу.

Ступінь обґрунтованості, достовірності та новизни наукових положень, висновків, рекомендацій. На користь достовірності розрахункових результатів роботи свідчить застосування такого широко відомого і апробованого метода, яким є метод функціонала електронної густини Кона-Шема та використання перевірених на

численних прикладах потенціалів Хеменна-Шльотера. Встановленню достовірності одержаних результатів присвячений окремий параграф другого розділу дисертаційної роботи, де проводиться тестовий розрахунок волокна нанокристалічної целюлози з порівнянням із результатами, одержаними іншими авторами.

Практичне значення одержаних 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.

Дисертанткою Здешиц А. В. отримано велику кількість результатів, які задовольняють критеріям наукової новизни, достовірності та практичної значимості. Отримані дані узгоджуються з результатами експериментів, виконаних іншими дослідниками.

Деякі аспекти роботи викликають зауваження і потребують спеціального обговорення **в критичній частині відзиву.**

1. Можливо, блок-структуру коду слід було б винести в окремий Додаток.
2. Оскільки надійність розрахункової моделі та одержаних результатів має першостепеневе значення, можливо, слід було б додати ще один розділ (четвертий) – Перевірка надійності та співставлення результатів – за рахунок скорочення Розділу 2.
3. У дисертації наявні деякі орфографічні, граматичні та стилістичні огріхи.
4. Яка енергія обрізання базису приймалася в роботі? Яка кількість базисних функцій приймалася в роботі для різних задач?
5. У ряді випадків використовується вираз «енергетично вигідно». Який критерій мається на увазі?
6. На мій погляд, робота виглядала б краще, якщо параграфи 1, 3, у Розділі 3 супроводжувались більш детальною постановкою задачі з наведеними геометричними та фізичними даними досліджуваних структур.
7. Відсутнє порівняння отриманих результатів розрахунку електронних властивостей обраних гібридних структур з результатами практичних досліджень.

Висловлені зауваження не знецінюють результатів дисертаційної роботи. Дисертація Здешиц Анастасії Валеріївни є самостійним і завершеним науковим дослідженням електронних властивостей гібридних наноструктур. Авторкою отримано значну кількість результатів, які задовольняють критеріям наукової новизни, достовірності та практичної значимості.

Основні результати роботи повною мірою відображені в 5 публікаціях у фахових виданнях та пройшли апробацію на багатьох наукових конференціях. Автореферат дисертації повно та адекватно відображає структуру, зміст та основні висновки роботи.

Вважаю, що за об'ємом, новизною, науковим рівнем та практичною вагомістю отриманих результатів дисертаційна робота «Електронні властивості гібридних наноструктур» відповідає вимогам МОН України, а її автор, Здешиц Анастасія Валеріївна, заслуговує на присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Провідний науковий співробітник
відділу електроніки твердого тіла
Інститут фізики НАН України,
доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник

І. І. Ясковець



ВІРНО
ВЧЕНИЙ СЕКРЕТАР
ІФ НАН УКРАЇНИ
В. С. МАХЖАРА