

## Рецензія

Доктора фізико-математичних наук, професора  
Гохмана Олександра Рафаїловича  
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»

### *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.

### *Актуальність та обґрунтованість теми дисертаційного дослідження*

Біосенсорика – це найважливіша сфера біо-нанотехнологій. Оскільки з поширенням епідемій, регулярним виробничим забрудненням середовища, природними катастрофами та військовими подіями потреба в оперативному виявленні різного роду забруднень постійно зростає. Це означає, що є необхідність безперервного створення та вдосконалення сучасних датчиків і сенсорів. А для цього потрібні все більш різноманітні матеріали високої якості.

У разі трекового біосенсора потрібні відповідні трекові матеріали. Важливо також знати особливості проходження іонних рідин через такі треки, тому що саме ці процеси визначають механізми функціонування трекового біосенсора. Взагалі дифузійні процеси в

пористих матеріалах дуже мало вивчені. І таким чином сформульовані у дисертації завдання є актуальними та обґрунтованими.

Для вирішення поставлених завдань застосовано метод комп'ютерного моделювання. Проблема полягає в тому, що характеристики треків, що отримуються у діелектричних плівках методом іонної імплантації, залежать від умов одержання та є досить складними. При їх вивченні доводиться одночасно змінювати низку параметрів, що зручно робити у процесі комп'ютерного моделювання.

Структури, які одержують у результаті іонної імплантації тонких плівок, для подальшого виробництва приладів вимагають додаткової обробки, а саме спеціального хімічного травлення. Для моделювання всього комплексу процесів при виготовленні остаточної трекової структури у дисертації розроблено модифікацію класичної молекулярної динаміки (МД). Модифікований варіант МД має широку сферу застосування. Він може бути застосований для моделювання різних структурних перетворень, зокрема радіаційного дефектоутворення. Суть модифікованого варіанту МД полягає в тому, що враховується зміна параметрів міжатомних потенціалів у процесі структурних перетворень матеріалів.

#### *Зв'язок роботи з науковими програмами, планами і темами*

Дисертація є частиною експериментальних і теоретичних досліджень фізичних процесів у штучних пористих матеріалів, які проводяться на кафедрі інноваційних технологій та методики навчання природничих дисциплін Державного закладу «Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського». Дисертація виконувалася в межах теми «Штучні пористі матеріали як основа створення новітніх біосенсорів» (Державний реєстраційний

номер: 0122U000850) та теми "Нові комп'ютерні моделі у нанотехнологіях" (Державний реєстраційний номер: 0122U000072).

У роботі розроблені відповідні комп'ютерні програми, за допомогою яких одержані важливі результати, що стосуються проходження іонних потоків через трекові структури.

### *Основні результати*

Створено комп'ютерну модель треку. Модель містить на стінках треку локальні центри, включаючи центри розсіяння, адсорбційні центри, і дозволяє, зокрема, досліджувати якість біосенсору в залежності від його геометричних параметрів. На основі досліджень дифузії у треках встановлено, що специфіка міграційних процесів у пористих матеріалах обумовлена взаємодією мігруючих частинок з локальними центрами на внутрішніх стінках пор. Досліджено вплив дефектної структури на внутрішніх поверхнях треків на переміщення іонних потоків у треках. Встановлено, що визначальний вплив на кінетику іонного потоку в треку мають центри адсорбції. Запропоновано модель центру адсорбції, згідно з якою частинка потоку, що потрапила в потенційну яму центру адсорбції, виштовхується в об'єм треку силою Гука. Також проходження іонного потоку через трек залежить від просторового розташування центрів адсорбції на внутрішніх поверхнях треку. Комп'ютерний експеримент показав, що при зменшенні діаметра треку при певному значенні діаметра призводить до різкого зниження щільності потоку. З'ясувалося, що це відбувається тоді, коли відносна кількість частинок потоку, які взаємодіють із внутрішньою поверхнею треку, різко зростає. Запропоновано механізм зміни кінетики потоку через трек, коли у потік потрапляють забруднення. Встановлено, що відбувається

своєрідна зміна кінетики потоку, залежно від відмінності фізичних характеристик частинок основного потоку та чужорідних частинок.

Комп'ютерний експеримент показав, що кінетика іонного потоку через трек залежить від зарядового стану як частинок в іонному потоці, так і чужорідних частинок, а також локальних центрів на стінках треку. Детальне вивчення комп'ютерної моделі треку дозволяє визначити відповідні технологічні умови виготовлення біосенсорів підвищеної якості, а також прогнозувати їх надійність та експлуатаційний ресурс.

Таким чином можна зробити висновок, що дисертантом проведено значний обсяг роботи. Результати мають як наукове значення (з'ясування особливостей дифузійних процесів у пористих матеріалів), так і практичне значення (з'ясування можливостей покращення параметрів певного типу сучасних біосенсорів).

Достовірність та надійність одержаних результатів підтверджується порівнянням з даними, отриманими в експериментальних лабораторіях, а також порівнянням з літературними даними.

Є деякі зауваження:

1. У модифікованому варіанті МД бажано було б детальніше описати вибір функціональної залежності параметрів потенціалів.
2. При вивченні структури стін треку бажано було б застосувати принцип мінімуму енергії в оцінці кількості шарів.
3. Поняття шорсткості внутрішньої поверхні треку визначено недостатньо чітко.

Незважаючи на ці зауваження, вважаю, що робота І. І. Дончева представляє науковий та практичний інтерес, задовольняє існуючі вимоги, які пред'являються до дисертацій на здобуття наукового

ступеня доктора філософії (PhD), а її автор заслуговує на присудження відповідного ступеня.

Рецензент

Доктор фізико-математичних наук, професор,  
професор кафедри прикладної математики  
та інформатики Державного закладу  
«Південноукраїнський національний  
педагогічний університет  
імені К. Д. Ушинського»



Олександр ГОХМАН

