

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

Бовгири Ростислава Вікторовича

“Структура й електронні властивості наноструктур на основі оксиду цинку”,
подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук
за спеціальністю 01.04.18 – фізика і хімія поверхні

1. Актуальність теми досліджень.

Оксид цинку – напівпровідник групи з'єднань A_2B_6 з широкою забороненою зоною (3,36eV) займає особливе місце серед широкозонних напівпровідників, які інтенсивно досліджуються через свою багатогранність. Він володіє високою прозорістю у видимому діапазоні спектру, має високу електронну мобільність, сильну люмінесценцію при кімнатній температурі, тому знайшов широке використання в різних галузях промисловості, техніки і медицини. Крім цього ZnO є недорогим, хімічно стабільним, легким у приготуванні, не токсичним, а більшість домішкових матеріалів, які використовуються з ним, також є легко доступними. Завдяки всім позитивним якостям цей матеріал знайшов застосування при виробництві сонячних батарей, фотокаталізаторів, лазерів УФ та газових датчиків, акустичних пристроїв, світлодіодів, тощо.

Згадані властивості з особливістю проявляються у наноструктурованих системах. Наноструктури на основі ZnO є кандидатами для виготовлення УФ випромінювачів і перемикачів та газових сенсорів. Наноматеріали на основі ZnO синтезують у різноманітних формах, а дослідження поверхневих ефектів у них є перспективними як з фундаментальної, так із практичної точок зору. Встановлення залежності електронної структури від морфології і атомної структури наноструктур на основі оксиду цинку та її вплив на їхні оптико-спектральні властивості є важливою і **актуальною** проблемою.

Про актуальність тематики дисертаційного дослідження свідчить її зв'язок з п'ятьма державними науковими програмами та науково-технічними проектами: «Математичне моделювання та теоретико-експериментальні

дослідження процесів формування низькорозмірних функціональних структур з використанням методів лазерної та іонно-променевої обробки», «Теоретико-експериментальні дослідження особливостей формування тонкоплівкових та нанопорошкових функціональних матеріалів під дією інтенсивних іонних та лазерних потоків», «Математичне моделювання та експериментальні дослідження процесів формування низькорозмірних твердотільних функціональних матеріалів з допомогою інтенсивних лазерних та іонних потоків», науково-технічних проектів: «Розробка та створення газосенсорної системи на основі низьковимірних металооксидів», «Створення газового сенсора на основі матричних (4x4) нанопорошкових комірок з алгоритмом аналізу їх свічення для реєстрації сумішей газів»

2. Обґрунтованість та достовірність одержаних результатів базується на використанні взаємодоповнюваних теоретико-експериментальних методів досліджень: метод псевдопотенціалу в наближенні теорії функціонала густини, градієнтні методи пошуку мінімумів на поверхні потенціальної енергії для оптимізації структурних моделей, X-променева малокутова дифрактометрія, растрова електронна мікроскопія, енерго-дисперсійний аналіз, люмінесцентний спектральний аналіз. Результати, отримані при використанні різних методик, несуперечливо пов'язані між собою та узгоджуються з літературними даними інших авторів. Достовірність висновків підтверджується також апробацією роботи на конференціях та семінарах, численними цитуваннями робіт автора в публікаціях інших дослідників та визнанням пріоритетності отриманих ним результатів.

3. Основні результати та їх наукова новизна

Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних літературних джерел. Загальний обсяг дисертації містить 180 сторінок, 83 малюнки, 14 таблиць і 145 бібліографічних джерел.

Робота носить оригінальний і цілісний характер, оскільки передбачає математичне моделювання процесів формування наноструктур, вивчення їх

структури і властивостей та прогнозування використання спостережуваних ефектів для практичних цілей газової сенсорики. Застосування сучасного теоретичного апарату для моделювання процесів формування нанокластерів у поєднанні із прецизійними експериментальними вимірюваннями дозволило отримати цілісні результати по встановленню закономірностей лазерного формування нанопорошкових матеріалів в умовах хімічно-активного середовища, дослідити особливості їхньої структури та оптико-спектральних властивостей.

Оцінюючи результати роботи, слід відзначити найголовніші з них, які визначають наукову новизну:

1. встановлені умови формування атомної структури та параметрів енергетичного спектра електронів у кластерах ZnO сформованих з лазерної плазми;
2. виявлені стабільні структурні конфігурації та встановлені закономірності зміни електронної структури нанокластерів ZnO легованих атомами 3d перехідних хімічних елементів (Mn, Co, Cu) та визначений вплив даних атомів на магнітні властивості нанокластерів;
3. встановлені закономірності люмінесцентного свічення нанопорошків на основі ZnO при адсорбції низки газів та виявлені особливості чутливості смуг свічення ($\lambda=430, 525$ нм) до природи адсорбованих молекул;
4. виявлені закономірності модифікації власнодефектної структури та фізико-хімічних властивостей нанопорошкового ZnO в процесі імпульсної лазерної імплантації домішок благородних металів (Ag, Au, Pt) та виявлено ріст сенсорної чутливості для оптимальних за розміром наногранул (40-60 нм) ZnO.

4. Практична значимість роботи полягає у встановленні фізико-технологічних закономірностей і засад побудови багатоелементної матричної системи для створення газового сенсора нового покоління. Одержані результати можуть бути покладені в основу розробки нових прогресивних

способів створення низьковимірних твердотільних структур з використанням лазерної реактивної технології для цілей оптоелектроніки та газової сенсорики.

Новизна розроблених методик захищена Патентом України на корисну модель.

5. Зауваження до дисертаційної роботи

1. У роботі автор наводить результати дослідження зонної структури та подає значення ширини забороненої зони, розраховані з використанням апроксимації узагальнених градієнтів GGA та наближенні з використанням поправок Хабарда GGA+U функціоналів. Варто було б провести розрахунки з використанням інших функціоналів для опису обміну і кореляції взаємодії електронів, зокрема, гібридних обмінно-кореляційних функціоналів B3LYP і HSE чи метагібридних функціоналів родини M06.

2. Автор наводить експериментальні результати дослідження впливу лазерного поверхневого легування благородними металами (Ag, Au, Pt) на адсорбційну здатність нанопорошкового ZnO та вказує на зростання сенсорної чутливості до газів. Для теоретичного опису цих результатів доцільно було провести моделювання енергетичних і сенсорних властивостей нанокластерів ZnO із вказаними легуючими атомами, проте, в дисертації наведено результати моделювання кластерів оксиду цинку із домішками 3d перехідних елементів.

3. В роботі для дослідження нанорозмірних об'єктів використано кластерний підхід. Як зміняться результати, коли б до даних систем застосувати зонні підходи, що широко відомі в літературі для макроскопічних систем, які володіють трансляційною симетрією. Причому параметри наноструктур на основі оксиду цинку доступні, а їх розміри дозволяють застосування цього підходу.

4. В роботі зустрічаються невдало сформульовані речення, окремі граматичні, стилістичні та пунктуаційні помилки. На окремих рисунках підписи англійською мовою (наприклад Рис. 3.27.).

Зазначені недоліки, однак, не применшують значення виконаної дисертантом Бовгирою Р.В. роботи і не ставлять під сумнів наукову та практичну цінність основних результатів, які виносяться на захист.

6. Висновки про відповідність дисертації встановленим вимогам

Дисертаційна робота є завершеним науковим дослідженням, в якому отримано та обґрунтовано нові наукові результати в галузі фізики і хімії поверхні.

Основні результати дисертаційної роботи представлені у провідних фахових виданнях, які індексовані в міжнародних наукометричних базах Scopus або Web of Science та збірниках матеріалів наукових конференцій.

Автореферат і опубліковані роботи повністю відображають зміст дисертації. Вважаю, що за актуальністю теми, обсягом, науковою новизною, практичною цінністю отриманих результатів і висновків дисертаційна робота Бовгири Ростислава Вікторовича «Структура й електронні властивості наноструктур на основі оксиду цинку» повністю відповідає вимогам «Порядку присудження наукових ступенів».

затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24.07.2013 року №567, зі змінами, внесеними згідно з Постановами КМУ № 656 від 19.08.2015 р., № 1159 від 30.12.2015 р. та № 567 від 27.07.2016 р.), а її автор, Бовгира Ростислав Вікторович, заслуговує на присудження йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.18 фізика і хімія поверхні.

Офіційний опонент
доктор фізико-математичних наук, доцент,
професор кафедри фізики
Дрогобицького державного педагогічного
університету імені Івана Франка,



Білинський І. В.

Підпис Білинського І.В. засвідчую
Вчений секретар Дрогобицького державного
педагогічного університету імені Івана Франка

Галів М. Д.

