

ВІДГУК

офіційного опонента

на дисертаційну роботу Савки Степана Степановича

«Ріст, структура та газосенсорні властивості нанопорошкових металооксидів», представлену до захисту на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук зі спеціальності 01.04.18- фізика і хімія поверхні.

Застосування нанотехнологій для формування сенсорів з високими чутливістю та роздільною здатністю вимагає постійного вдосконалення фізико-технологічних умов одержання наноматеріалів та пошуку оригінальних структур для побудови нових приладів на їх основі. Отримання наноматеріалів з наперед заданими, стабільними характеристиками потребує комплексних теоретичних та експериментальних досліджень, спрямованих на встановлення закономірностей впливу умов і режимів синтезу на їх структуру та фізико-хімічні властивості.

Експериментальне дослідження механізмів формування наночастинок є технічно складною і трудомісткою задачею, тому проведення моделювання механізмів формування нанооб'єктів дозволяє досить детально досліджувати процеси росту і синтезу наночастинок і, відповідно, ціленаправлено контролювати процеси синтезу наноматеріалів. Таким чином, узгодження результатів математичного моделювання з одержаними експериментальними даними забезпечує формування відповідних наноструктурованих матеріалів при їх синтезі. Актуальною проблемою є вивчення впливу основних параметрів синтезу нанопорошкових металооксидів та наноструктур типу «ядро-оболонка», на їхні структурні, морфологічні та фізико-хімічні властивості.

Дисертаційна робота Савки С.С. виконана у наукових лабораторіях відділу фізико-математичного моделювання низьковимірних систем Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України в рамках наукових програм МОН та НАН України, що підтверджує її актуальність

Метою даної роботи є встановлення закономірностей процесів формування морфології росту, структури нанопорошкових металооксидів та вивчення їх оптичних та газосенсорних властивостей з метою побудови газосенсорної системи нового покоління. Дане завдання дисертант успішно виконав.

Дисертаційна робота носить оригінальний та цілісний характер. В процесі її виконання використано комплекс теоретичних та експериментальних взаємодоповнюючих методів досліджень, проведено порівняння одержаних результатів з опублікованими даними для відповідних аналогів досліджуваних об'єктів. Результати експериментів надійно

відтворювались, чому сприяв контроль умов і режимів синтезу досліджуваних матеріалів.

Серед низки нових оригінальних результатів, отриманих в даній дисертаційній роботі, хотілося б відзначити наступні:

- виявлені закономірності формування нанокластерів ZnO та встановлені залежності розмірів, форми та структури отриманих наночастинок від умов і режимів їх отримання;
- встановлені закономірності зміни товщини та щільності оксидного шару структур типу «ядро-оболонка» Zn-ZnO від початкових умов стану системи, концентрації газу та розмірів нанокластерів Zn;
- встановлені закономірності формування газосенсорних властивостей наночастинок ZnO, легованих домішками благородних металів (Au, Ag, Pt), та виявлено високу чутливість легованого нанопорошку до різних газів. Встановлено тенденцію до зниження адсорбційної здатності нанопорошків ZnO зі зменшенням розмірів наногранул до 40-60 нм;
- виявлені особливості фотолюмінесцентних властивостей нанопорошкових металооксидів на основі ZnO, TiO₂, SnO₂, в т.ч. лазерномодифікованих та поверхнево-легованих домішками Ni, Cu, Sn в газах O₂, N₂, H₂, CO, CO₂;
- встановлені люмінесцентні властивості складних нанопорошків ZnO/TiO₂, ZnO/SnO₂, Zn₂SiO₄:Mn і Zn₂SiO₄:Ti в різних газових середовищах, показано, що зміна газового середовища призводить до досить значних змін інтенсивностей спектрів фотолюмінесценції та їх деформацій;
- з'ясовані фізико-технологічні особливості і засади функціонування багатоелементної матричної системи як основи газового сенсора нового покоління.

Ряд отриманих автором нових результатів мають вагомим практичне значення. Зокрема, сформовано діючий лабораторний макет газосенсорної системи на основі синтезованих матеріалів. Новизна розробки захищена патентом України на корисну модель.

Дисертаційна робота добре апробована. Результати досліджень, представлених в дисертаційній роботі, доповідались та обговорювались на низці міжнародних науково-технічних конференцій, зокрема на таких: XV–XVII International Conference on Physics and Technology of Thin Films and Nanosystems (Ivano-Frankivsk, Ukraine, 2015, 2017, 2019), 4th–7th, International research and practice conference «Nanotechnology and Nanomaterials» (NANO) (Ukraine, 2016–2019), науковій конференції «Перспективи розвитку озброєння та військової техніки Сухопутних військ» (Львів, Україна, 2017).

Основні результати дисертаційної роботи опубліковані в 19 наукових працях, 6 статей опубліковані у профільних реферованих журналах, які включені до міжнародних наукометричних баз "Scopus" та/або "Web of Science".

Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних літературних джерел, який налічує 127 бібліографічних посилань. Робота викладена на 151 сторінці, містить 3 таблиці та 67 рисунків.

У вступі обґрунтована актуальність теми дисертації, сформульовано мету та основні завдання дослідження, визначено наукову новизну і практичну цінність роботи. Розкрито зв'язок роботи з науковими програмами і планами, наводяться об'єкт і предмет досліджень, подана інформація щодо апробації і публікацій результатів досліджень та особистий вклад дисертанта в опубліковані роботи. Подається загальна характеристика роботи.

У першому розділі висвітлено загальний стан досліджуваної теми. Представлено моделі кристалічних структур оксиду цинку, діоксиду олова та діоксиду титану. Описано властивості даних матеріалів та сфери технічних застосувань. Продемонстровано результати моделювання процесів формування наночастинок з газової фази та описано їх властивості в залежності від початкових умов. Здійснено аналіз робіт, присвячених вивченню люмінесцентних властивостей ряду матеріалів. Проаналізовано фізичні процеси формування люмінесцентних властивостей оксиду цинку.

У другому розділі описано переваги методу молекулярної динаміки для математичного моделювання процесів формування досліджуваних нанокластерів та подано математичний апарат потенціалу міжатомних взаємодій ReaxFF. Описано методику одержання нанопорошкових металооксидних матеріалів шляхом імпульсної лазерної абляції металічних мішеней в хімічно-активному газовому середовищі. Наведені схеми лабораторних технологічних установок імпульсного лазерного легування та модифікації нанопорошкових матеріалів. Описані методики дослідження фотолюмінесцентних та газосенсорних властивостей нанопорошкових металооксидних матеріалів.

Третій розділ присвячено моделюванню процесів конденсації нанокластерів ZnO з газової фази методом молекулярної динаміки. Використовуючи різні початкові умови здійснено моделювання процесу окислення нанокластерів Zn з подальшим утворенням структур типу «ядро-оболонка» та встановлено залежності товщини і щільності оксидного шару сформованих наноструктур від початкової температури системи, концентрації газу та розмірів нанокластерів Zn.

У четвертому розділі здійснено моделювання методом молекулярної динаміки процесів адсорбції кисню на поверхні оксиду цинку. Проведено аналіз структури та фазового складу отриманих матеріалів. Досліджено вплив адсорбції газів на зміну інтенсивності фотолюмінесценції нанопорошкових металооксидів на основі ZnO , TiO_2 , SnO_2 , в т.ч. лазерно-модифікованих та поверхнево-легованих домішками. Встановлено, що поверхневе легування нанопорошкового ZnO благородними металами підвищує селективність та газочутливість, зокрема, при детектуванні водню. Вивчені фотолюмінесцентні властивості складних нанопорошків в різних газових середовищах та встановлено, що зміна складу сорбованого газу призводить до значних змін інтенсивності спектру фотолюмінесценції та його деформації.

Результати досліджень використано при виготовленні лабораторного макету газосенсорної системи. У роботі газового сенсора використано мультисенсорну багатоканальну систему, яка складається з набору адсорбентів металооксидів різної модифікації, які характеризуються відмінною чутливістю по відношенню до різних газів та одночасне вимірювання сигналів усіх комірок матриці за допомогою ПЗС-матриці.

Автореферат дисертації достатньо повною мірою відображає зміст опублікованих наукових праць та дає повну уяву про зміст дисертації. Дисертаційна робота є закінченим науковим дослідженням у рамках поставленого завдання.

В той же час, до дисертації є декілька зауважень:

1. Результати моделювання методом молекулярної динаміки процесів формування досліджуваних матеріалів представлені для нанокластерів розміром (2-4 нм), проте дані експериментальних досліджень стосуються переважно більших кластерів (30-100 нм), а тому, потребує уточнення наскільки справедливо використовувати дані моделювання до експериментально отриманих наночасток;
2. У роботі вибрано оптимальні умови і режими отримання матеріалів для побудови газосенсорної системи, проте відсутня інформація про способи видалення адсорбованих молекул газу, що фактично є необхідною операцією для відновлення вихідних параметрів системи;
3. У дисертації відсутні дані про вплив параметрів оточуючого середовища (вологість, температура тощо) на характеристики чутливості газосенсорної системи та відсутні дані стосовно її калібрування.
4. Для встановлення робочих режимів роботи газового сенсора необхідно мати приклад цифрової обробки сигналу при експозиції в суміші газів з наперед відомим складом, що демонструвало б характеристику приладу.

Однак, вказані вище зауваження не стосуються висновків та наукових положень, що формують наукову новизну отриманих результатів, ніяким чином не зменшують наукову і практичну цінності роботи, достовірність отриманих у ній результатів та обґрунтованість основних висновків.

Таким чином, на основі проведеного аналізу основного змісту дисертаційної роботи можна зробити висновок про те, що основна її мета досягнута завдяки успішному виконанню завдань роботи. Завдання та методи досліджень кожного розділу пов'язані між собою та підпорядковані основній меті дисертаційного дослідження. Робота носить цілісний і оригінальний характер.

Враховуючи високий науковий рівень дисертаційного дослідження, актуальність теми, її наукову та практичну цінності, вважаю, що дисертаційна робота Савки Степана Степановича «Ріст, структура та газосенсорні властивості нанопорошкових металооксидів» повністю відповідає вимогам МОН України до дисертаційних робіт представлених на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.18-фізика і хімія поверхні, а її автор Савка Степан Степанович заслуговує присудження йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.18-фізика і хімія поверхні.

Офіційний опонент
доктор фізико-математичних наук,
професор кафедри матеріалознавства
і новітніх технологій
ДВНЗ «Прикарпатський національний
університет імені Василя Стефаника»

Б.І. Рачій

Рачій Б.І.
19

Прикарпатський національний
університет імені Василя Стефаника
030215/421
19