

ВІДЗИВ

офіційного опонента

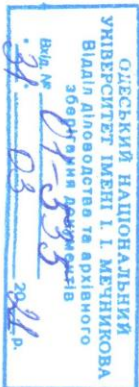
на дисертаційну роботу Соломенко Анастасії Геннадіївни
«Функціоналізація двовимірних напівпровідникових матеріалів»,
подану на здобуття наукового ступеня доктора філософії з галузі знань
«10 Природничі науки» за спеціальністю «104 Фізика та астрономія»

Двовимірні напівпровідникові матеріали мають виняткові фізичні та хемічні властивості, що робить їх привабливими складовими для численних потенційних застосувань в оптоелектроніці, для зберігання енергії, при зондуванні та у біомедицині. Однак такі унікальні властивості непросто налаштувати чи то змінити. Наразі є нагальна потреба в розробці нових модифікацій різних композицій доступних двовимірних матеріалів для виявлення їхньої багатofункціональності у конкретних застосуваннях. Функціоналізація двовимірних матеріалів являє собою потужну стратегію регулювання та модуляції їхніх властивостей, а також надання їм нових функцій. У цьому контексті такі функціоналізаційні впливи як поєднання двовимірних матеріалів в одну структуру, прикладення тиску, вигин, адсорбція молекул поверхнею є реальними шляхами для вивчення їхньої потенційної природи як результату модифікування; тому тема дисертаційної роботи є *актуальною* для сьогодення.

Актуальність роботи підтверджується спільним науковим проектом закладів вищої освіти, наукових установ Національної академії наук і Національних галузевих академій наук України, що фінансувався Державним фондом фундаментальних досліджень, «Дослідження оптимальних умов проходження електромагнітних сигналів через метаструктуру із фотонною щільною у повно-оптичному логічному пристрої» (№ д/р 0117U007110, № д/р 0118U000970), який виконувався при ДВНЗ «Криворізький державний педагогічний університет» спільно з Інститутом фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України (у проєкті дисертантка брала участь як виконавиця).

Дисертація пані А.Г. Соломенко містить елементи *наукової новизни*. У роботі вперше:

- встановлено, що поєднання нефункціоналізованих і функціоналізованих графенових ділянок за наперед спланованим викроєм в одну структуру уможливорює контрольовану зміну електронних властивостей;
- визначено, що процес флюоризації як функціоналізаційний вплив спричиняє перерозподіл електричного заряду між окремими ділянками двовимірних графеноподібних комбінованих структур С/СFН з різними концентраціями атомів Флюору;
- встановлено, що дія статичного тиску на комбіновану графеноподібну структуру С/СН як фотонного кристалу приводить до перерозподілу електронної густини у напрямку ковалентних зв'язків С–Н, що спричинює зміну ширини електронної забороненої зони,



анізотропію діелектричних властивостей за різних напрямків вектора електричного поля збурювальної електромагнетної хвилі та зсув піків у спектрі поглинання;

- виявлено немонотонний характер зміни ширини забороненої зони моношару чорного фосфорена залежно від адсорбційної віддалі молекул сечовини, що впливає на його провідність, яку можна регулювати, контролюючи локалізацію адсорбованих карбамідних молекул.

*Наукове та практичне значення одержаних результатів полягає в розробці рекомендацій для: 1) виготовлення механічних сенсорів тиску на основі двовимірної комбінованої структури C/CH, оскільки змінюючи ступінь стиснення цієї структури, можна керувати її електронними та фотонними властивостями; 2) виготовлення вбудованих двовимірних *p-n*-переходів в шарах чорного фосфорена, оскільки адсорбція його моношаром молекул сечовини приводить до формування ділянок електричного заряду різних знаків.*

Дану дисертацію викладено на 159 сторінках машинописного тексту, і за своєю *структурою* вона складається з переліку умовних позначень, Вступу, трьох розділів, Висновків, Списку використаних джерел, що містить 242 найменування, та одного додатку.

У *Вступі* обґрунтовано актуальність теми дослідження, показано зв'язок дисертаційної роботи з науковими темами, визначено мету, завдання, об'єкт, предмет і методи дослідження, розкрито наукову новизну та практичне значення результатів роботи, особистий внесок дисертантки у працях, опублікованих у співавторстві, зазначено апробацію результатів дисертації.

У *першому розділі* наведено змістовний літературний огляд відомостей про атомарну структуру, електронні та фізичні властивості двовимірних напівпровідникових матеріалів. Також тут проаналізовано різні підходи до функціоналізації двовимірних напівпровідникових матеріалів, серед яких — ковалентна або нековалентна функціоналізації поверхонь і механічні впливи. З'ясовано, що зміна внутрішньої архітектури або типу функціоналізації дає можливість керувати електронними властивостями одержаного матеріалу, а різноманіття геометрій відкриває цілий спектр додаткових можливостей. Тому дослідження функціоналізації двовимірних напівпровідникових матеріалів представляє як теоретичний, так і практичний інтерес.

У *другому розділі* подано методичку розрахунків на основі методу псевдопотенціалу із перших принципів і теорії функціоналу електронної густини, починаючи від основних теорфізичних положень і закінчуючи конкретними алгоритмами й описом втілювання їх у програмному кодї, наведено розрахункові вирази для знаходження різних фізичних величин; зроблено оцінку вірогідності обчислень авторським програмним засобом шляхом виконання контрольних розрахунків ефективних електричних зарядів в околі ізольованих атомів H, C, O, P, F, Cl.

Стосовно цього розділу є *два зауваження*.

- 1) Матеріал першого, другого та третього підрозділів Розділу 2 містить чимало загально відомих теоретичних положень. Доцільно було б скоротити детальний опис їх, просто зазначивши посилання на відповідні першоджерела та підручники.
- 2) Порівняння розрахованих тут перерізів просторового розподілу густини валентних електронів і значень ефективних електричних зарядів в околі ізолюваних атомів з відповідними літературними даними (з відхилами у $\approx 3-40\%$) все ж таки не в повній мірі підтверджує вірогідність усіх результатів розрахунку складних гіпотетичних структур.

У *третьому розділі* представлено результати тестування щодо способів легування двовимірних напівпровідникових матеріалів. На відміну від звичайних метод легування, застосовуваних для неорганічних об'ємних напівпровідників, тут воно може відбуватися за допомогою перенесення заряду чи то дипольних взаємодій. Авторкою досліджено вплив деформації вигинанням, статичного тиску, ступеня флюоризації й адсорбції молекул на просторовий перерозподіл заряду, що є основою для створення діодного ефекту в двовимірних напівпровідникових матеріалах. Дисертанткою запропоновано також принципово нове поєднання нефункціоналізованого та функціоналізованого графенових шарів в єдину двовимірну структуру за наперед спланованим викроєм, що надалі може мати технологічне застосування у фотоніці. Тестування нових підходів щодо легування двовимірних матеріалів здійснювалося шляхом обчислення електронних і фотонних властивостей графеноподібних структур, а саме, графен-графан (C/CH), графен-флюорографен (C/CF), графен-хлорографен (C/CCl), і чорного фосфорена. Функціоналізувальні впливи на комбіновані структури, що проявлялися у зміні електронних і фотонних властивостей, було висвітлено у порівняльній аналізі просторових розподілів густини валентних електронів, густин електронних станів, ширин заборонених зон, Кулонових потенціалів уздовж обраних напрямків, значень зарядів в областях різного розміру, діелектричних матриць, макроскопічних відносних проникностей і спектрів поглинання.

До змісту цього розділу дисертації пані А.Г. Соломенко є наступні *два зауваження*.

1. На жаль, фізичну природу поглинання електромагнетного випромінювання комбінованими структурами тут не було проаналізовано. І тому, наприклад, не ясно, що означає термін «адсорбційний спектр поглинання» та які ж оптичні процеси йому відповідають? У чому полягає різниця між «адсорбційним спектром поглинання» фотонним кристалом на основі флюорографенової структури в контексті рис. 3.28–3.30 (підрозділ 3.4) і «спектром поглинання» фотонним кристалом стосовно рис. 3.21–3.23 (підрозділ 3.3)?
2. У підрозділі 3.5 наведено значення ширини забороненої зони для чистого моношару чорного фосфорена у 6,8 еВ, але відсутні коментарі стосовно методики одержання цього значення. І чи узгоджу-

ється воно з відповідними літературними даними?

Нарешті, щодо обох останніх (2-го та 3-го) розділів даної дисертації маю *зауважити*, що тут не наведено порівняння результатів, одержаних за допомогою авторської програми, із відповідними розрахунками на основі інших широко апробованих програмних пакетів: Gaussian 03, GAMESS, ORCA, DFTB+.

Також зазначу, що у дисертації подекуди зустрічаються орфографічні (та й граматичні) недогляди.

Але зазначені зауваження не є принциповими і не понижують наукову та практичну цінність результатів і висновків даної дисертаційної роботи.

Обґрунтованість і вірогідність одержаних дисертанткою результатів дослідження забезпечуються достатнім рівнем відповідності розроблених теоретичних моделей реальним об'єктам, а також використанням широко відомої й апробованої методи функціоналу електронної густини Кона–Шема та перевічених на численних прикладах псевдопотенціалів типу Бачелета–Хаманна–Шльотера із перших принципів. Встановленню вірогідності результатів, одержаних авторським програмним комплексом, присвячено окремий параграф другого розділу дисертаційної роботи, у якому здійснено контрольний розрахунок ефективних електричних зарядів в околі ізольованих атомів Н, С, О, Р, F, Cl з порівнянням із доступною довідниковою інформацією.

Наукові положення та висновки дисертації сповна викладено в 13 опублікованих наукових працях, серед яких у міжнародних реферованих наукових виданнях — 5 статей, 4 з них — у виданнях, які було проіндексовано в наукометричній базі даних Scopus (з індексом Гірша пані А.Г. Соломенко, який дорівнює 2). Результати наукових досліджень, що представлені у дисертації, доповідалися й обговорювалися на 8 конференціях міжнародного та всеукраїнського рівнів.

Отже, дисертаційна робота пані А.Г. Соломенко «Функціоналізація двовимірних напівпровідникових матеріалів» є завершеним самостійним дослідженням, яке за науковою новизною, обґрунтованістю, науково-практичною значущістю одержаних результатів відповідає вимогам пп. 9–18 «Порядку проведення експерименту з присудження ступеня доктора філософії», затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України № 167 від 6 березня 2019 року, а її авторка, — пані Анастасія Геннадіївна Соломенко, — заслуговує на присудження їй наукового ступеня доктора філософії з галузі знань «10 Природничі науки» за спеціальністю «104 Фізика та астрономія».

Директор Інституту металознавства
ім. Г.В. Курдюмова НАН України
чл.-кор. НАН України, д-р фіз.-мат. н., проф.



В.А. Татаренко

В.А. Татаренко