

**ЗАТВЕРДЖУЮ**

Проректор з наукової роботи Одеського національного університету імені І.І. Мечникова, член-кореспондент НАН України, доктор біологічних наук, професор Іваниця В.О.

**ВИСНОВОК**

Одеського національного університету імені І.І. Мечникова  
про наукову та практичну цінність дисертації  
**Соломенко Анастасії Геннадіївни**

**«Функціоналізація двовимірних напівпровідникових матеріалів»**  
що подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії в галузі знань  
«10-Природничі науки» за спеціальністю  
«104-Фізика та астрономія».

**ВИТЯГ**

**з протоколу №1** Фахового семінару кафедри експериментальної фізики Одеського національного університету імені І.І. Мечникова від 26 жовтня 2020р.

**ПРИСУТНІ:** Науково-педагогічні та наукові працівники кафедри експериментальної фізики, а саме: Сминтина В.А.(головуючий) , д.ф.-м.н., професор, завідувач кафедри експериментальної фізики; Ваксман Ю.Ф.(рецензент), д.ф.-м.н., професор; Ніцук Ю.А(рецензент)., д.ф.-м.н., професор; Чебаненко А.П. (секретар засідання), к.ф.-м.н, доцент; Маслеєва Н.В. к.ф.-м.н., доцент; Стукалов С.А., ст.викладач, Терещенко А.В., к.ф.-м.н., с.н.с.; Філевська Л.М., с.н.с., Конопельська Н.В., завідувачка лабораторією, Каракіс Ю.М.,провідний фахівець; Кіосе М.І., Вергелес К.О., Теплякова І.В. – аспіранти.

З присутніх – 3 докторів наук та 3 кандидатів наук – фахівці за профілем представленої дисертації.

Головуючим на засіданні відкритим голосуванням було обрано д.ф.-м.н., професора, завідувача кафедри експериментальної фізики Сминтину В.А.

**СЛУХАЛИ:** Основні положення дисертаційної роботи випускниці аспірантури Криворізького державного педагогічного університету Соломенко Анастасії Геннадіївни здобувачки наукового ступеню «доктор філософії» за темою дисертаційної роботи: «Функціоналізація двовимірних напівпровідникових матеріалів» представленої на здобуття наукового ступеня «доктор філософії» за спеціальністю «104 – Фізика та астрономія

Тему дисертації затверджено “8” грудня 2016 р. на засіданні Вченої ради Криворізького державного педагогічного університету протокол №5. ». Науковий керівник: доктор ф.-м.н., професор Балабай Р.М.

Робота виконана на кафедрі фізики та методики її викладання Криворізького державного педагогічного університету.

Попередню експертизу дисертаційної роботи та наукових праць провели та підготували проект висновку доктор фізико-математичних наук, професор кафедри експериментальної фізики Ваксман Ю.Ф. та доктор фізико-математичних наук, професор кафедри експериментальної фізики Ніцук Ю.А.

Соломенко А.Г. зробила доповідь про основні наукові положення та результати дисертаційної роботи.



По матеріалу доповіді було задано 11 питань, на які доповідачка дала правильні та ґрунтовні відповіді.

Питання були задані:

Кандидат фізико-математичних наук, доцент Чебаненко А.П.:

1. Як збігаються результати Ваших розрахунків з експериментальними результатами?
2. Яка точність отриманих Вами результатів?

Ваксман Ю.Ф.:

3. Які області практичного застосування отриманих результатів?

Доктор фіз.мат наук, професор Ніцук Ю.А.:

4. Чи можна за допомогою Вашого методу розраховувати параметри інших наноструктурованих

С.н.с. Філевська Л.М.:

5. Як враховувався ефект кулонівського відштовхування електронів та утворення квадрупольних моментів?

Кандидат фіз.-мат. наук, с.н.с. Терещенко А.В.:

6. Як впливає оточуюче середовище на ширину забороненої зони?

Доктор фіз.мат наук, професор Сминтина В.А.

7. Як ступінь фторизації впливає на ширину забороненої зони?

Доктор фіз.мат наук, професор Ніцук Ю.А.:

8. Як зміняться результати розрахунків при збільшенні провідності матриці?

Аспірант Кіосе М.І.:

9. В чому полягає актуальність застосування в якості легуючої молекули карбаміду?

10. Як Ваші результати можуть бути застосовані в сенсориці?

Аспірантка Теплякова І.В.:

11. Чим пояснюється збільшення ширини забороненої зони комбінованих структур C/CH, C/CF та C/CCl у порівнянні з окремо взятими вихідними об'єктами (C, CH, CF, CCl)?

#### **ВИСТУПИЛИ:**

Доктор фізико-математичних наук, професор Балабай Р.М. (науковий керівник) відзначила високу наукову кваліфікацію здобувачки, що дозволяє ставити та вирішувати складні наукові задачі, послідовність, спрямованість на досягнення результату, що дозволило Соломенко А.Г. провести дослідження двовимірних напівпровідникових структур.

Доктор фізико-математичних наук, професор Ваксман Ю.Ф. (рецензент) відзначив високий науковий рівень і актуальність роботи, раціональну структуру роботи.

Доктор фізико-математичних наук професор Ніцук Ю.А. (рецензент) відзначив відповідність роботи спеціальності «104-Фізика та астрономія», П.10, 11 Порядку присудження наукового ступеню «Доктор філософії». У ході обговорення дисертаційної роботи до неї не було висунуто жодних зауважень щодо самої суті роботи.

#### **УХВАЛИЛИ:**

Прийняти висновок рецензентів на дисертаційну роботу Соломенко Анастасії Геннадіївни у такій редакції:



## **Висновок**

**про наукову новизну, теоретичне та практичне значення результатів дисертації  
Соломенко Анастасії Геннадіївни  
на тему «Функціоналізація двовимірних напівпровідникових матеріалів» на здобуття ступеня доктора філософії в галузі знань 10-«Природничі науки» зі спеціальності 104-«Фізика та астрономія»**

**Актуальність теми дослідження.** Питання, пов'язані з функціоналізацією двовимірних структур, є актуальними як з наукової, так і з практичної точки зору. Двовимірні напівпровідникові матеріали являють собою найтонші напівпровідники, які володіють новими властивостями порівняно зі своїми об'ємними аналогами. Основними їх перевагами є товщина в один або декілька атомів, відсутність поверхнево обірваних зв'язків, чималі заборонені зони, висока рухливість носіїв, висока гнучкість та здатність штучного поєднання. В роботі вперше визначено підходи до модифікації властивостей двовимірних матеріалів, показано, що поєднання нефункціоналізованих та функціоналізованих ділянок графена за наперед спланованим малюнком в одну структуру дає контрольовані зміни електронних властивостей.

**Мета і завдання дослідження та зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Метою дисертаційної роботи А.Г. Соломенко є виявлення нових факторів впливу на електронні та фотонні властивості двовимірних напівпровідникових матеріалів шляхом обчислювального експерименту з використанням авторського програмного коду. Для досягнення мети поставлені та розв'язані такі **завдання**: - побудувати адекватні атомні моделі двовимірних напівпровідникових структур та розробити сценарії проведення розрахункового експерименту, які забезпечать масивами даних для визначення функціоналізаційних впливів на електронні та фотонні властивості двовимірних матеріалів; адаптувати та вдосконалити, відповідно до моделей та сценаріїв, розрахунковий алгоритм і спосіб виведення розрахованих даних у авторському пакеті програм, який застосовує сучасні теоретичні методи фізики твердого тіла, а саме: метод функціоналу електронної густини та псевдопотенціал із перших принципів; провести обчислювальні експерименти, систематизувати і проаналізувати отримані масиви даних для визначення функціоналізаційних впливів на електронні та фотонні властивості двовимірних матеріалів.

Дисертаційна робота виконана на кафедрі фізики та методики її викладання КДПУ в рамках наукових досліджень виконаних за проектом ДФФД «Дослідження оптимальних умов проходження електромагнітних сигналів через мета структуру із фотонною щільною повно-оптичному логічному пристрої», номер держреєстрації 0114 U003454.

**Наукова новизна:**



- встановлено, що поєднання нефункціоналізованих та функціоналізованих ділянок графена за наперед спланованим малюнком в одну структуру дає контрольовані зміни електронних властивостей;
  - констатовано перерозподілення електричного заряду у площині графеноподібних комбінованих структур C/CH та C/CF з утворенням областей різного знаку;
  - визначено, що процес фторизації як функціоналізаційний вплив спричиняє перерозподіл електричного заряду між окремими ділянками двовимірних комбінованих структур C/CFH з різною концентрацією атомів фтору;
  - показано, що при збільшенні ступеня фторизації двовимірна комбінована структура C/CFH як фотонний кристал послаблює проходження електромагнітної хвилі у напрямку збурення  $\vec{E} \parallel \vec{X}$ ;
  - оцінено довжину хвилі піку в адсорбційному спектрі двовимірної комбінованої структури C/CH як фотонного кристалу при 0%-вій фторизації в напрямку  $\vec{E} \parallel \vec{X}$ , що відповідає області м'якого рентгена (0,82 нм). Подальший процес фторизації призводить до зміщення піків в область ультрафіолетового випромінювання;
  - встановлено, що дія статичного тиску на комбіновану структуру C/CH як фотонного кристалу призводить до перебудови електронної густини у напрямку ковалентних зв'язків C-H, що викликає зміну ширини електронної забороненої зони, анізотропію діелектричних властивостей при різних напрямках вектора електричного поля збурюючої електромагнітної хвилі та зсув піків у спектрі поглинання;
  - визначено, що деформація вигину як функціоналізаційний вплив призводить до збільшення різниці заряду у комбінованих вигнутих структурах C/CH, C/CF, C/CCl та до збільшення ширини забороненої зони порівняно з недеформованими;
  - зафіксовано, що функціоналізація моношару чорного фосфорена молекулами карбаміду призводить до перерозподілу електричного заряду та формування ділянок різного знаку;
  - виявлено немонотонний характер зміни ширини забороненої зони моношару чорного фосфорена залежно від адсорбційної відстані молекул карбаміду, що впливає на його провідність, якою можна керувати контролюючи локалізацію
- Всі одержані автором результати є новими і вперше встановленими.

**Теоретичне та практичне значення одержаних результатів дисертаційного дослідження Соломенко А.Г.** полягає в розробці рекомендацій при виготовленні механіч-



них сенсорів тиску на основі двовимірної комбінованої структури C/CH. Визначено, що змінюючи ступінь стиснення структури можна керувати її електронними та фотонними властивостями; виготовленні вбудованих двовимірних p-n переходів в графеноподібних комбінованих структурах C/CH та C/CF, що є поєднанням нефункціоналізованих та функціоналізованих ділянок графена за наперед спланованим малюнком. Констатовано перерозподілення електричного заряду з утворенням областей різного знаку в названих структурах; виготовленні вбудованих двовимірних p-n переходів в шарах чорного фосфорена. Встановлено, що адсорбція моношаром чорного фосфорену молекул карбаміду призводить до формування ділянок електричного заряду різного знаку.

**Апробація наукових результатів.** Основні результати, отримані під час виконання роботи, доповідалися на всеукраїнських і міжнародних конференціях: XVI Міжнародна конференція з фізики і технології тонких плівок та наносистем (2017), The International research and practice conference “Nanotechnology and Nanomaterials” (NANO-2017), Перспективні напрямки сучасної електроніки, інформаційних і комп'ютерних систем (2017, 2019), “СЕНСОРНА ЕЛЕКТРОНІКА ТА МІКРОСИСТЕМНІ ТЕХНОЛОГІЇ” (СЕМСТ-2018), The International research and practice conference “Nanotechnology and Nanomaterials” (NANO-2018).

**Публікації.** Основні наукові результати дисертації повністю висвітлені в п'яти наукових публікаціях, які розкривають основний зміст дисертації. Серед них – 2 статті у періодичних наукових виданнях інших держав, які входять до Організації економічного співробітництва та розвитку та Європейського Союзу, з наукового напрямку, за яким підготовлено дисертацію здобувача. Здобувачкою подано 3 статті у наукових виданнях, включених до переліку наукових фахових видань України, серед яких 2 статті у виданні, віднесеному до наукометричної бази Scopus. Разом, в профілі авторки в БД Scopus – 5 публікацій. Усі результати дисертації отримано автором самостійно. Здобувач приймав участь у обговоренні та інтерпретації отриманих результатів і написанні наукових робіт.

#### **Список опублікованих праць за темою дисертації:**

Дисертаційна робота та усі наукові публікації Соломенко А.Г. відповідають вимогам «Порядку проведення експерименту з присудження ступеня доктора філософії», затвердженого постановою КМУ №167 від 6 березня 2019р. Аналіз змісту дисертаційного дослідження та опублікованих праць вказує на дотримання здобувачем вимог академічної доброчесності.

#### **Статті у наукових фахових виданнях, індексованих у базі даних SCOPUS**

1. Balabai R.M., Lubenets A.G. Lateral junctions based on graphene with different doping regions. – Journal of Nano- and Electronic Physics. –2017. Vol.9. – №.5 – P. 05017-1 - 05017-8. [https://jnep.sumdu.edu.ua/uk/component/content/full\\_article/2309](https://jnep.sumdu.edu.ua/uk/component/content/full_article/2309)



2. Balabai R., Solomenko A. and Kravtsova D. Electronic and photonic properties of lateral heterostructures based on functionalized graphene depending on the degree of fluorination // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. – 2018. – Vol. 673, No. 1. – 125 – 136. <https://doi.org/10.1080/15421406.2019.1578502>
3. Balabai R. Solomenko A. Flexible 2D layered material junctions // *Applied Nanoscience*. – 2019. – Vol. 9 – №.5 – P.1011-1016. <https://doi.org/10.1007/s13204-018-0709->
4. Balabai R.M., Solomenko A.G. Use of the Adsorbed Organic Molecules as Dopants for Creation of the Built-in Lateral p-n Junctions in a Sheet of Black Phosphorene. – *Journal of Nano- and Electronic Physics*. – 2019. – Vol.11. – №.5 – 05033(5pp). [https://jnep.sumdu.edu.ua/uk/full\\_article/2886](https://jnep.sumdu.edu.ua/uk/full_article/2886)

#### Статті у наукових фахових виданнях України

5. Балабай Р.М., Коновал О.А, Соломенко А.Г. Фотонні та електронні властивості латеральних гетероструктур на основі функціоналізованого графена під дією статичного тиску // *Сенсорна електроніка і мікросистемні технології*. – 2018. – Т.15, № 3. – С.58-73. <https://doi.org/10.18524/1815-7459.2018.3.140397>

#### Публікації за матеріалами конференцій

1. Balabai R.M., Lubenetsz A.G. Lateral Junctions Based on Graphene with different doping regions // XVI Міжнародна конференція з фізики і технології тонких плівок та наносистем (присвячена пам'яті професора Дмитра Фреїка). Матеріали. / За заг. ред. проф. Прокопів В.В. – Івано-Франківськ : Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, 2017. – С.325.
2. Balabai R.M. Zalevskyi D.V., Lubenetsz A.G. Flexible 2D layered material junctions // The International research and practice conference “Nanotechnology and Nanomaterials” (NANO-2017). Abstract Book of participants of the International Summer School and International research and practice conference 23-26 August 2017, Chernivtsi. Edited by Dr. Olena Fesenko. – Kiev: SME Burlaka, 2017. – P.198. [http://www.iop.kiev.ua/~nano2017/files/Abstract\\_book.pdf](http://www.iop.kiev.ua/~nano2017/files/Abstract_book.pdf).
3. Балабай Р.М., Соломенко А.Г. Латеральні двовимірні структури з діодними властивостями // Перспективні напрямки сучасної електроніки, інформаційних і комп'ютерних систем (MEICS-2017). Тези доповідей на II Всеукраїнській науково-практичній конференції: 22-24 листопада 2017 р., м. Дніпро / Укладачі Іванченко О.В., Вашерук О.В.– Дніпро, Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, Кременчук: ПП Щербатих О.В., 2017.– С.272-273.
4. Balabai R., Konoval O., Solomenko A. Photonic and electronic properties of lateral heterostructures based on functionalized graphene under action of static pressure // 8<sup>a</sup> Міжнародна науково-технічна конференція “СЕНСОРНА ЕЛЕКТРОНІКА ТА МІКРОСИСТЕМНІ ТЕХНОЛОГІЇ” (СЕМСТ-8) (з виставкою розробок та промислових зразків сенсорів) Україна, Одеса, 28 травня – 1 червня 2018 р. Тези доповідей, 2018.– С.79



5. Balabai R., Kravtsova D., Solomenko A. Diode and photonic properties of lateral heterostructures based on functionalized graphene // The International research and practice conference "Nanotechnology and Nanomaterials" (NANO-2018). Abstract Book of participants of the International Summer School and International research and practice conference, 27-30 August 2018, Kiev. Edited by Dr. Olena Fesenko. – Kiev: SME Burlaka, 2018. – P.718.
6. Balabai R.M., Solomenko A.G. Strategy of creating integrated lateral p-n junctions in two-dimensional phosphorene, using adsorbed molecules as dopant impurities // XVII Міжнародна конференція з фізики і технології тонких плівок та наносистем. Збірник тез. / За заг. ред. проф. В.В. Прокопів. Івано-Франківськ : Видавництво Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника, 2019. – С.93.
7. Balabai R.M., Solomenko A.G. Strategy of creating integrated lateral p-n junctions in two-dimensional materials by adsorption of atoms or molecules // The International research and practice conference "Nanotechnology and Nanomaterials" (NANO-2019). Abstract Book of participants of the International Summer School and International research and practice conference 27-30 August 2019, Lviv. Edited by Dr. Olena Fesenko. – Kiev: LLC "Computer-publishing, information center", 2019. – P.163.
8. Балабай Р., Соломенко А. Функціоналіція двовимірних напівпровідникових матеріалів // Перспективні напрямки сучасної електроніки, інформаційних і комп'ютерних систем (MEICS-2019). Тези доповідей на IV Всеукраїнській науково-практичній конференції: 27-29 листопада 2019 р., м. Дніпро / Укладачі Іванченко О.В., Вашерук О.В.– Дніпро, Дніпровський національний університет імені Олеся Гончара, Кременчук: ПП Щербатих О.В., 2019.– С.185-186.

**Оцінка мови та стилю викладення.** Стиль написання дисертації відповідає науковому стилю. Викладення матеріалу є логічно послідовним, твердження та висновки є переконливими. В роботі використано велику кількість наукової термінології, використання посилань на першоджерела, наявність чіткої структури тексту (послідовний поділ на розділи, параграфи, абзаци), монологічний характер тексту, застосування комбінації складних та стандартних речень. Таким чином, за структурою, мовою та стилем викладення дисертаційна робота відповідає П.10 Положення про захист дисертації доктора філософії. Перевірка роботи на плагіат показала 90% її оригінальності

**Рекомендація дисертації до захисту.** Дисертаційна робота Соломенко Анастасії Геннадіївни «Функціоналізація двовимірних напівпровідникових матеріалів» відповідає спеціальності 104 –« Фізика та астрономія» та рекомендується до розгляду та захисту у спеціалізованій вченій раді на здобуття ступеня доктор філософії в галузі знань 10-



«Природничі науки» зі спеціальності 104-«Фізика та астрономія».

**Загальний висновок.** На підставі ретельного ознайомлення з дисертацією, основними публікаціями і результатами апробації на фаховому семінарі кафедри експериментальної фізики Одеського національного університету імені І.І.Мечникова вважаємо, що дисертаційна робота Соломенко Анастасії Геннадіївни «Функціоналізація двовимірних напівпровідникових матеріалів» за обсягом виконаних досліджень, і новизною отриманих результатів відповідає вимогам, передбаченим п.10 постанови Кабінету міністрів №167, і може бути поданою до захисту за спеціальністю 104- «Фізика та астрономія» на спеціалізованій вченій раді Одеського національного університету імені І.І.Мечникова.

Висновок підготовлений доктором фізико-математичних наук, професором Ніцуком Ю.А. та доктором фізико-математичних наук, професором Ваксманом Ю.Ф.

Рецензент  
Д.ф.-м.н., професор,  
професор кафедри експериментальної фізики

Ніцук Ю.А.

Рецензент  
Д.ф.-м.н., професор,  
професор кафедри експериментальної фізики

Ваксман Ю.Ф.

Головуючий на засіданні,  
д.ф.-м.н., професор,  
завідувач кафедри експериментальної фізики,

Сминтина В.А.

Секретар засідання,  
к.ф.-м.н., доцент,  
доцент кафедри експериментальної фізики

Чебаненко А.П.

26 жовтня 2020р.



Вчений секретар ОНУ  
імені І. І. Мечникова  
к.ф.-м.н., доцент

Курандо С. В.