

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

БОНДАРЯ Івана Сергійовича**«Вплив неоднорідностей кристалічної структури на електронні властивості гексагональної модифікації дихалькогеніду ніобію та графену»**

яка подана на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Матеріали на основі графену та споріднені сполуки зі стільниковою структурою атомних шарів пригортають неабияку увагу науковців різних галузей та технологів всього світу завдяки насамперед прояві релятивістських ефектів у дисперсійних залежностях. Інтерес до таких унікальних за своїми, як наслідок, фізичними та прикладними властивостями матеріалів спонукає дослідження і дихалькогенідів перехідних металів, що також відрізняються стільниковим укладанням атомів у шарах. Незважаючи на великий обсяг та різноманіття досліджень таких матеріалів, вплив неоднорідностей кристалічної решітки на їхні властивості залишається незрозумілим до кінця та потребує узагальнення.

Дисертаційна робота Бондаря І.С. «Вплив неоднорідностей кристалічної структури на електронні властивості гексагональної модифікації дихалькогеніду ніобію та графену» присвячена саме дослідженню впливу контрольованого спотворення трансляційної симетрії кристалічної структури на розподіл квазічастинних станів поблизу рівня Фермі і встановленню таким чином можливостей формування специфічних електронних властивостей перспективних матеріалів через модифікацію кристалічної структури, а також загальному опису відповідних взаємодій.

Метою дисертаційної роботи є встановлення загальних закономірностей впливу неоднорідностей кристалічної структури (дефекти з обірваними зв'язками) на електронні властивості шаруватих сполук дихалькогенідів деяких перехідних металів та графенів, а також можливостей отримання матеріалів з наперед заданими електронними властивостями на їх основі.

Для досягнення цієї мети автор побудував роботу на дослідженні аналогій поведінки діхалькогеніду ніобію гексагональної модифікації $2H\text{-NbSe}_2$ та графену з точковими вакансійними дефектами та границями різної хіральності.

Доробок дисертаційного дослідження свідчить про успішне втілення такого підходу при створенні замкнених наноформувань у діхалькогенідах перехідних металів під електронним опроміненням, саме як у вуглецевих матеріалах. За допомогою розвинених експериментальних засобів, теоретичних моделей та методів обчислювань в дисертації І.С. Бондаря одержані та аналізуються результати переважно рентгенівських досліджень. Завдяки цьому, в рамках запропонованих моделей, одержана інформація про зсув піка густини електронних станів під впливом дефектів, що доводить докорінну зміну провідного стану, а також стабільність досліджених матеріалів.

Відповідність теми дисертації науковим програмам, планам, темам. Дисертаційну роботу Бондаря І.С. виконано у відділі магнітних і пружних властивостей твердих тіл Фізико-технічного інституту низьких температур імені Б. І. Веркіна НАН України в рамках тематичного плану інституту відповідно до відомчих тем: «Спектроскопічні, транспортні, магнітні та пружні дослідження новітніх низько вимірних структур та надпровідних сполук» (номер держреєстрації 0112U002635, термін виконання 2012-2016 рр.), «Функціональні властивості новітніх надпровідних сполук і металовмісних спін та зарядово-впорядкованих структур» (номер держреєстрації 0117U002294, термін виконання 2017-2021 рр.).

Структура роботи. Дисертаційна робота Бондаря І.С. складається з анотацій, переліку умовних позначень, вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаної літератури та одного додатку. Основні результати роботи опубліковано в 15 наукових працях: 7 статтях у провідних спеціалізованих наукових журналах та 8 тезах доповідей у збірниках праць міжнародних та вітчизняних наукових конференцій.

У **Першому розділі** «Фізичні властивості шаруватих структур гексагональної модифікації дихалькогеніда ніобію та графена» обговорюються головні результати попередніх досліджень, що надає безсумнівні свідчення оригінальності, своєчасності та необхідності завдань дисертації.

Другий розділ «Методика експерименту і розрахункова модель» присвячено опису експериментальної установки, що складається з апаратного, криогенного модулів та обчислювальних засобів. Слід зазначити, що використана в наведених нижче дослідженнях методика вимірювання низькотемпературного рентгенівського розсіяння є унікальною за своїми характеристиками, завдяки кріостату оригінальної конструкції, що дозволяє працювати з об'єктами різної дисперсності при температурах рідкого гелію в режимах поточної реєстрації та безперервного кутового сканування. Такий оригінальний криогенний пристрій розробки та виготовлення ФТІНТ НАНУ відмінно пасує завданням дисертації. Порівняння з результатами дослідження пружного розсіяння на тих самих зразках забезпечує достовірність одержаних результатів та сприяє відокремленню електронних внесків. Також зрозуміло описано методику чисельного експерименту.

Третій розділ «Температурні залежності коливальних характеристик діселеніда ніобія і графенових матеріалів» присвячено перш за все ретельному дослідженню сполуки $2H-NbSe_2$ для виявлення особливостей поведінки поблизу електронних переходів в структурах з стільниковим укладанням атомів у шарах сандвіча, що утворює базовий структурний фрагмент з меншою гнучкістю, ніж моноатомний шар графену. Висновки цієї глави сприяють розумінню стабільності графенових матеріалів, які уявляються не такими зручними для експерименту.

У **Четвертому розділі** «Вплив протяжних дефектів на електронні властивості графенових наноплівки» розглядається вплив широко розповсюджених низьковимірних спотворень стільникової структури – границь з розташуванням атомів типу «zig-zag» та «armchair». Вельми цікавий і добре

обґрунтований результат цього розділу пояснює окремі експериментальні спостереження переходу графенових матеріалів у надпровідниковий стан.

П'ятий розділ «Вплив точкових дефектів на електронні властивості матеріалів на основі графена», що присвячено дослідженню впливу вакансійних дефектів, які становлять головну частину радіаційних дефектів, уявляється вкрай важливим за своїми результатами для розвитку нанотехнологій графенових компонент з використанням електронного опромінення.

Наукова і практична цінність отриманих результатів. Отримані вперше експериментальні дані щодо впливу дефектів на електронні густини поблизу фермі - рівня, можуть бути використані як довідкова інформація, а проведені теоретичні розрахунки сприяють теоретично обґрунтованому узагальненню результатів та прогнозуванню важливих властивостей таких матеріалів. Отримані дані з температурних та структурних залежностей допоможуть в розумінні механізмів виникнення надпровідності у графені.

Достовірність експериментальних результатів обумовлена використанням логічно обґрунтованих та апробованих методик, хорошою відтворюваністю результатів, одержаних різними методами, а також даними чисельного аналізу.

Результати є **актуальними та новітніми**. Особливо хотілось би звернути увагу на результат дослідження впливу границі zig-zag на електронні властивості графену, а саме виникнення локалізованих електронних станів на гранічних атомах. Такі стани відрізняються поведінкою, притаманною таммівським станам, що посіли особливе місце в електронній галузі і ретельно досліджувалися. Зацікавлює спостереження трансформації таких станів у хвилю за умов посилення взаємодії між гранічними атомами.

До недоліків дисертаційної роботи можна віднести відсутність результатів паралельних вимірів на монокристалічних зразках. Дисертаційна робота Бондаря І.С. має незначні стилістичні та друкарські помилки. Однак висловлені **зауваження** не впливають на загальну позитивну оцінку дисертаційної роботи,

яку можна вважати закінченою науковою працею, виконаною на високому науковому рівні.

Даючи загальну оцінку дисертації, можу засвідчити, що за обсягом виконаних експериментальних досліджень, одержаних результатів, актуальністю, новизною та високому науковому рівню, дисертаційна робота Бондара І.С. «Вплив неоднорідностей кристалічної структури на електронні властивості гексагональної модифікації дихалькогеніду ніобію та графену» повністю відповідає вимогам МОН України до кандидатських дисертацій, зокрема пп. 9, 11 «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України від 24.07.2013 р. № 567, а її автор Бондар Іван Сергійович заслуговує на присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Офіційний опонент:

член-кореспондент НАН України,
доктор фізико-математичних наук,
професор, завідувача відділу радіоспектроскопії,
заступник директора
Інституту радіофізики та електроніки
ім. О.Я. Усикова НАН України

С.І. Тарапов

Підпис

члена-кореспондента НАН України,
доктора фізико-математичних наук,
професора, завідувача відділу радіоспектроскопії,
заступника директора
Інституту радіофізики та електроніки
ім. О.Я. Усикова НАН України
Сергія Івановича Тарапова

засвідчую:

Вчений секретар
Інституту радіофізики та електроніки
ім. О.Я. Усикова НАН України,
кандидат фізико-математичних наук



І.Є. Почаніна