

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

Конотопа Олексія Павловича

**«Особливості структури та складу вільних двокомпонентних кластерів
на основі інертних газів»,**

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

Інтенсивні дослідження структури і фізико-хімічних властивостей кластерів – нанорозмірних поліатомних агрегацій – почалися наприкінці минулого століття. Інтерес фундаментальної та прикладної науки к кластерам обумовлений наступними обставинами. Кластери, по суті, є перехідним станом речовини між окремими атомами або молекулами та масивними тілами, тому фізика кластерів виступає сполучною ланкою між молекулярною фізикою і фізикою твердого тіла. Вивчення кластерів дозволяє встановити механізми формування тієї чи іншої властивості масивного тіла. В той же час завдяки високій питомій площі поверхні кластерів, їх властивості можуть радикально відрізнитись від властивостей макросистеми. Це відкриває широкі перспективи для використання кластерів у різних областях людської діяльності, починаючи від створення нових функціональних матеріалів і закінчуючи медициною.

Значний інтерес для вирішення фундаментальних проблем, пов'язаних з гомо- та гетерогенною нуклеацією, кінетикою фазових перетворень, а також механізмів формування структури макросистеми, представляє вивчення утворення і зростання кластерів при об'ємній конденсації газів в струменях, що адіабатично розширюються. Особливий інтерес для дослідників представляють ван-дер-ваальсовські кластери. Відносна простота сил міжатомної взаємодії дозволяє використовувати ці об'єкти для перевірки теоретичних моделей і розрахунків, встановлювати закономірності загального характеру, що властиві кластерам речовин з ненаправленим типом зв'язку.

Варто зазначити, що до теперішнього часу переважно досліджувалися гомогенні (однокомпонентні) кластери. У випадку гетерогенних (двокомпонентних) кластерів їх структура і властивості залежать не лише від розміру, але і від складу і взаємного розташування компонент в кластері. Через складність теоретичного моделювання і невелику кількість експериментальних досліджень, механізми формування і росту таких кластерів залишалися практично невивченими. Тому тема дисертаційної роботи О.П. Конотопа, що присвячена дослідженню складу, структури і

фазових перетворень в двокомпонентних кластерах на основі інертних газів, безумовно є **актуальною**. Слід при цьому відзначити, що в роботі О.П. Конотопа об'єднані два аспекти – фундаментальний і прикладний. Перший пов'язаний з вивченням впливу розмірного чинника на структуру бінарних кластерів, встановлення механізмів її формування у надзвуковому газовому струмені. Другий аспект пов'язаний із діагностикою бінарних кластерних пучків, тобто із встановленням залежностей структури і складу двокомпонентних кластерів від параметрів газових сумішей на вході надзвукового сопла.

Актуальність дисертаційної роботи підтверджується також тим, що результати дослідження були одержані в ході виконання планових науково-дослідних робіт за відомчою тематикою, у яких О.П. Конотоп брав участь як відповідальний виконавець: «Кооперативні та розмірні ефекти у наноструктурах з ван-дер-ваальсівськими та водневими зв'язками» (№ держреєстрації 0107U000950, 2007–2011 рр); «Елементарні збудження та фазові стани простих молекулярних твердих тіл і наноструктур» (№ 0112U002639, 2012–2016 рр); «Термодинамічні властивості наноструктурованих систем, композитів, молекулярних твердих тіл в екстремальних умовах низьких температур» (№ 0117U002290, 2017–2021 рр).

Для вирішення поставлених у дисертаційній роботі завдань був використаний один із методів структурного аналізу – метод прецизійної електронографії, що зарекомендував себе найбільш чутливим та ефективним методом для вивчення структури малих нанорозмірних об'єктів, в тому числі кластерів. Виміри проводилися у широких інтервалах температури, тиску та складу газової суміші на вході сопла. Об'єктами досліджень виступали кластери відразу трьох бінарних систем – Ar-Kr, Kr-Xe, N₂-Ar, – що дозволило авторові перейти від знаходження залежностей, конкретних для даної системи, до встановлення закономірностей, загальних для бінарних ван-дер-ваальсових кластерів на основі інертних газів. Експериментальні дані добре узгодженні з результатами, отриманими іншими авторами. Аналіз даних був проведений в рамках сучасних концепцій фізики кластерів, у тому числі розвинених для ван-дер-ваальсових кластерів. Усе це стало запорукою **достовірності** отриманих результатів та **обґрунтованості** зроблених у дисертації висновків і рекомендацій.

Дисертаційна робота Конотопа О.П. містить низку **нових важливих** результатів, серед яких особливо слід відзначити наступні:

1. Показано, що компонентний склад кластерів Ar-Kr та Kr-Xe суттєво залежить від термодинамічних властивостей газових сумішей на вході в

сопло: вміст важкого компонента зменшується зі зниженням температури та/або збільшенням сумарного тиску суміші.

2. Встановлено, що коефіцієнт збагачення двокомпонентних кластерів важким компонентом є функцією початкового складу газової суміші. При цьому для досліджених у дисертації бінарних систем максимум коефіцієнту збагачення спостерігається при однаковому вмісті важкого компонента в суміші ($\approx 5\%$). Визначені значення критичної концентрації в сумішах компонента з більшою енергією зв'язку, при яких формуються лише гомогенні кластери.

3. Досліджена залежність розміру кластерів Ar-Kr від властивостей газових сумішей на вході надзвукового сопла. Встановлено, що принцип «співвідносних струменів» Хагени виконується для бінарних кластерних струменів. В результаті отримане розширене співвідношення Хагени, що дає можливість розрахунковим методом визначати розміри вільних двокомпонентних ван-дер-ваальсових кластерів у фазі твердих розчинів заміщення.

4. Виявлено незалежність взаємозв'язку між складом і середнім розміром двокомпонентних кластерів від вихідних термодинамічних властивостей газової суміші. Отримане емпіричне співвідношення, що пов'язує компонентний склад кластерів з їх середнім розміром і складом вихідної газової суміші, що дає можливість контролювати характеристики вільних двокомпонентних кластерів у надзвукових газових струменях.

5. Встановлено, структурний фазовий перехід від ГЦК структури до змішаної ГЦК+ГЦП для двокомпонентних кластерів Ar-Kr і однокомпонентних кластерів Ar та Kr характеризується однаковим пороговим розміром кластерів ($\approx 1,1 \cdot 10^4$ ат./кл.). При цьому в розмірному діапазоні двофазних ГЦК+ГЦП кластерів спостерігається суттєве збільшення вмісту ГЦП фази в гетерогенних кластерах порівняно в гомогенними кластерами такого ж розміру.

6. Виявлена кореляція між вмістом ГЦП фази в кластерах Ar та Ar-Kr та кількістю дефектів пакування деформаційного типу в ГЦК фазі, що підтверджує ймовірну роль таких дефектів як зародків ГЦП фази. Запропоновано дифузійний механізм ГЦК-ГЦП перетворення в вільних кластерах інертних газів.

Наукова значущість результатів дисертації полягає в тому, що вони доповнюють існуючі фундаментальні уявлення про механізми формування і трансформації структури гетерогенних кластерів, що формуються в надзвукових газових струменях. Дані проведених у роботі досліджень містять важливу інформацію щодо залежностей складу і розміру бінарних

кластерів від термодинамічних параметрів газу на вході надзвукового сопла, що створює умови для ефективного керування структурою і морфологією гетерогенних кластерів і, як наслідок, їх фізико-хімічними властивостями.

Практична значущість роботи полягає у тому, що отримані у ній результати можуть бути використані у ряді технологічних розробок, серед яких створення газоструйного джерела вакуумного ультрафіолету та ультрам'якого рентгенівського випромінювання для імітації сонячної радіації у космічному матеріалознавстві.

Основні результати дисертаційної роботи Конотопа О.П. **в повному обсязі й вчасно** опубліковані у 18 наукових працях, з них 5 наукових статей у фахових журналах та 13 – у збірках матеріалів та тез докладів міжнародних та вітчизняних наукових конференцій. Серед робіт, опублікованих за темою дисертації, немає публікацій, ідентичних за змістом. Дисертаційна робота не містить ознак академічного плагіату.

Автореферат в цілому **повно** та **точно** відображає зміст дисертації.

По змісту та оформленні дисертації і автореферату слід зробити декілька **зауважень**:

1. Всі дослідження дисертації були зроблені із використанням лише однієї, хоча й потужної методики – структурної електроннографії. Для кращої достовірності доцільно би було поряд з електроннографією використовувати інші експериментальні методи, наприклад мас-спектрометрію (визначення розміру кластерів) або оптичні дослідження (визначення складу кластерів).

2. На жаль в роботі відсутній аналіз отриманих результатів на засадах «нанотермодинаміки», яка в певній мірі має пряме відношення до кластерів.

3. Виникають сумніви щодо правомірності застосування закону Вегарда для визначення концентрації компонент в кластерах, адже відомо, що параметр ґратки нанорозмірних об'єктів може суттєво залежати від їх розміру.

4. У авторефераті на всіх ілюстраціях, що відображують результати досліджень, приведені дані лише для кластерів Ar-Kr. Ілюстрації стосовно кластерів інших двох досліджуваних систем (Kr-Xe та N₂-Ar) у авторефераті не представлені.

5. У авторефераті на рис.7 дані для кластерів Ar-Kr позначені темними колами, а в підпису до рис.7 – темними квадратами. В роботі зустрічаються і інші друкарські помилки.

Зазначені зауваження не знижують високої наукової та практичної цінності роботи Конотопа О.П.. Їх можна розглядати як побажання для подальшого розвитку проведених досліджень.

Матеріали дисертації можуть бути використані в центрах по дослідженню впливу на матеріали космічної техніки сонячної радіації, імітація якої здійснюється атомно-кластерними пучками, збудженими електронами, а також у фундаментальних науково-дослідних роботах Інституту металофізики імені Г.В. Курдюмова НАН України, Інституту проблем матеріалознавства імені І.Н. Францевича НАН України, ФГІНТ імені Б.І. Веркіна НАН України, та ін.

Вважаю, що дисертація О.П. Конотопа є **закінченою науковою працею**, яка містить **нові обґрунтовані результати** проведених здобувачем досліджень. В роботі отримані цінні дані відносно механізму формування в надзвуковому струмені газової суміші гетерогенних кластерів, моделювання якого ускладнене участю в процесі багатьох явищ, що відбуваються як при розширенні двокомпонентної газової суміші, так і в ході бінарної нуклеації. Отримані результати важливі як для фундаментальної науки, так і для практичного використання ван-дер-ваальсових кластерів. Проведені в роботі дослідження відповідають **паспорту спеціальності 01.04.07 – фізика твердого тіла**.

На мою думку, дисертація Конотопа О.П. повністю відповідає вимогам МОН України, що пред'являються до дисертацій на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук, зокрема пп. 9, 11, 12 «Порядку присудження наукових ступенів», а її автор, Конотоп Олексій Павлович, заслуговує присудження вченого ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальності 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Офіційний опонент,
професор кафедри фізики кристалів
Харківського національного університету
імені В.Н. Каразіна МОН України,
доктор фізико-математичних наук,
професор



Ю.І. Бойко

Підпис Ю.І. Бойко затверджую
вчений секретар
ХНУ імені В.Н. Каразіна

