

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

Конотопа Олексія Павловича

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

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

Актуальність теми. Фізика нанооб'єктів, особливо таких як кластерні наноструктури, є багатообіцяючим напрямком розвитку фізики твердого тіла. Великий інтерес дані об'єкти представляють і для різних застосувань в області хімії і біології. Особливе місце у фізиці кластерів займають дослідження наночасток з ван-дер-ваальсовими силами міжмолекулярної взаємодії, насамперед кластерів інертних газів. Завдяки своїй простоті, такі кластери є ідеальними модельними системами для тестування і подальшого розвитку теоретичних положень щодо формування геометричної та електронної структур кластерів, а також їх хімічних та фізичних властивостей. Окрім фундаментальних аспектів, кластерні пучки інертних газів мають широке застосування у прикладних дослідженнях та розробках, серед яких створення яскравих джерел рентгенівського випромінювання та інтенсивних електронних і іонних пучків як результат взаємодії газових кластерів з потужними лазерними імпульсами.

Дослідження і практичне вживання кластерів відносно малого розміру ($<10^5$ ат/кл) гальмуються відсутністю надійних і інформативних способів дослідження структури і стану кластерів. Особливо маловивченими залишаються двокомпонентні кластери, вивчення яких дозволило б мати додаткові важелі управління структурою і властивостями кластерів (розмір, концентрація домішки). Дисертація О.П. Конотопа присвячена експериментальному дослідженню формування структури та складу двокомпонентних кластерів на основі інертних газів. Кластери формувалися при конденсації струменя газової суміші, що витікала у вакуум, і були вільними, тобто не піддавались впливу різного роду підкладок. Рішення питань впливу вихідних умов газової суміші на склад, розмір і структуру двокомпонентних ван-дер-ваальсових кластерів, механізмів структурних перетворень в них, складає зміст дисертації і визначає її актуальність для нанофізики і для подальшого розвитку теорій формування твердих тіл.

Дослідження, що лягли в основу дисертації О.П. Конотопа, виконані у відділі спектроскопії молекулярних систем і наноструктурних матеріалів

Фізико-технічного інституту низьких температур імені Б.І. Веркіна НАН України в рамках тематичного плану ФТІНТ за трьома темами НАН України.

Метою роботи було отримання нових експериментальних даних для встановлення закономірностей формування компонентного складу і структурних станів, механізмів структурних перетворень у вільних двокомпонентних кластерах на основі інертних газів. Вважаю, що в межах поставлених автором завдань мету досягнуто.

Структура дисертації. Дисертація О.П. Конотопа складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних джерел. Усі розділи містять власні короткі вступи та висновки.

Перший розділ «Структура і властивості вільних від підкладки однокомпонентних і бінарних ван-дер-ваальсових кластерів» містить огляд літературних даних щодо сучасного стану теоретичних і експериментальних досліджень структури та властивостей змішаних кластерів інертних і простих молекулярних газів. В кінці розділу наведено постановку завдань. Літературний огляд, а також бібліографія, свідчать про достатній обсяг знань і ґрунтовний науковий підхід автора до проблеми, що вивчається.

У другому розділі «Методика експерименту» докладно наведені методичні особливості досліджень, зокрема отримання вільних від підкладки двокомпонентних ван-дер-ваальсових кластерів у надзвукових струменях газових сумішей та використання прецизійної електронографії для дослідження структури та складу вільних кластерів. Подана у розділі інформація є достатньо докладною і в той же час легкою для розуміння.

Третій розділ «Діагностика бінарних кластерних пучків: склад і розмір кластерів, що формуються в надзвукових струменях газових сумішей Ar-Kr, Kr-Xe та N₂-Ar» присвячений результатам експериментальних досліджень компонентного складу і розміру двокомпонентних кластерів на основі інертних газів. Шляхом варіювання температури, тиску та концентрації компонент газової суміші на вході сопла автор встановлює взаємозв'язок між цими параметрами та складом, розміром і структурою вільних гетерогенних кластерів. Аналіз експериментальних даних дозволив автору отримати напівемпіричні співвідношення, одне з яких кількісно описує ефект збагачення кластерів компонентом з більшою енергією міжмолекулярного зв'язку, а інше оцінює розміри кластерів як функцію вихідних параметрів газової суміші. Результати досліджень свідчать, що як розмір двокомпонентних кластерів, так концентрація компонентів у них погоджуються із принципом «співвідносних струменів» Хагени.

Четвертий розділ «Структурний ГЦК-ГЦП перехід в гетерогенних кластерах Ar-Kr» присвячений вивченню механізму утворення ГЦП фази у

кластерах інертних газів при збільшенні їх розміру. Для цього автором було виконане порівняльне дослідження ГЦК-ГЦП перетворення у двокомпонентних кластерах Ar-Kr та однокомпонентних кластерах аргону і криптону. Встановлено, що вміст ГЦП фази у кластерах Ar-Kr істотно більше, ніж у кластерах Ar та Kr. Однак в обох випадках повного ГЦК-ГЦП перетворення не відбувається. Автором встановлено взаємозв'язок між фазовим складом кластерів та кількістю дефектів пакування в них, на основі чого запропоновано механізм утворення і росту ГЦП фази в одно- та двокомпонентних кластерах інертних газів.

Наукова новизна. Найбільш важливими результатами дисертації, що складають її наукову новизну, є наступні:

– встановлені діагностичні характеристики двокомпонентних кластерних пучків Ar-Kr та отримано розширене співвідношення Хагени, що показує зв'язок розміру бінарних кластерів із вихідними термодинамічними умовами та складом газової суміші;

– виявлено, що розмір кластерів визначається за сумарним вихідним тиском газової суміші, а не за парціальними тисками її компонентів;

– встановлено існування та знайдені значення критичної вихідної газової концентрації компонента з більшою енергією зв'язку, вище за яку незалежно від термодинамічних параметрів газу лише однокомпонентні кластери цього компоненту формуються у струмені;

– виявлено незалежність від вихідних термодинамічних умов в газовій суміші зв'язку між розміром вільних бінарних кластерів та їх складом, що свідчить про справедливість принципу «співвідносних струменів» Хагени для двокомпонентних кластерів;

– отримано співвідношення, що пов'язує компонентний склад кластерів з їх розміром і складом газової суміші, яке дає можливість контролю вільних складу кластерів у надзвукових двокомпонентних струменях;

– зафіксовано інтенсифікацію росту ГЦП фази в двокомпонентних кластерах Ar-Kr порівняно з двокомпонентними кластерами Ar та Kr;

– знайдено кореляцію між фазовим складом кластерів інертних газів та кількістю дефектів пакування деформаційного типу в них, що свідчить про роль таких дефектів як зародків ГЦП фази;

– показано, що механізм формування ГЦП фази в вільних кластерах інертних газів має термічно активаційний дифузійний характер.

Достовірність і обґрунтованість результатів дисертації О.П. Конотопа забезпечується: великою кількістю експериментальних даних, отриманих з використанням сучасного комплексного експериментального устаткування; ретельністю постановки експериментів і обробки отриманих результатів, включаючи статистичну обробку експериментальних даних; публікацією робіт автора в провідних міжнародних фахових виданнях та апробацією результатів дисертації на багатьох міжнародних конференціях.

Наукова і практична цінність отриманих результатів. Отримані автором експериментальні дані щодо залежностей складу, розміру та структури вільних двокомпонентних кластерів на основі інертних газів від вихідних умов у газовій суміші, безсумнівно, мають велике значення для подальших фундаментальних та прикладних досліджень бінарних кластерних пучків. Підбор параметрів роботи генератора газокластерного струменя є дуже важливим чинником ефективності поглинання кластерами енергії лазерного випромінювання у дослідженнях кластерної наноплазми. Дані проведених в роботі досліджень також дають важливу інформацію про залежність атомної структури двокомпонентних кластерів від їх розміру. Вказана інформація є цінною для широкого круга речовин з ненаправленим типом міжатомного зв'язку, що можуть бути використані для створення нових матеріалів у нанофізиці.

Основні результати дисертації О.П. Конотопа повністю висвітлено у 5 наукових статтях у провідних фахових виданнях України та за кордоном, що індексуються у наукометричній базі даних Scopus. Результати були представлені на 13 міжнародних конференціях і опубліковані в збірниках тез цих конференцій. Дисертація є завершеною науковою працею, написана логічною та зрозумілою науковою мовою і оформлена відповідно діючим вимогам. Автореферат повністю та вірно відображає зміст і структуру дисертації. Тема роботи і суть її наукових результатів пов'язані зі структурою та складом нанорозмірних твердотільних об'єктів, і повністю відповідають паспорту спеціальності 01.04.07 – фізика твердого тіла.

До змісту дисертації є наступні **зауваження**:

1. У роботі для аналізу розмірів і структури отриманих кластерів використовувався метод електронної дифракції, при цьому на основі ширини дифракційних ліній були зроблені висновки щодо середнього розміру кластерів. Можна припустити, що отримані кластери мають значний розподіл за розмірами, що при урахуванні малих розмірів кластерів, має дати додатковий внесок у ширину лінії. Втім у роботі не було проведено аналізу впливу подібного уширення дифракційних ліній на отримані результати.
2. Ще одним внеском до ширини дифракційної ліній та їх положення може бути флуктуації періоду ґратки, оскільки для малих кластерів відомо, що через значний внесок поверхні, період ґратки поблизу неї може збільшуватися. Таким чином можна передбачити досить великі флуктуації структурних параметрів для малих кластерів у порівнянні з великими.

3. У роботі усі отримані об'єкти описувалися як кластери, тобто проміжні структури між одиночними атомами/молекулами і об'ємними кристалами. В той же час відомо, що у деяких випадках нанокластери з розмірами приблизно 20 нм вже за своїми характеристиками співпадають з характеристиками об'ємних кристалів, зокрема мають схожу зонну структуру. Тобто такі об'єкти коректніше називати нанокристали, ніж нанокластери. Чи можна провести подібне розділення для вільних кластерів, отриманих у роботі, відповідно до їх розмірів?
4. У роботі встановлено, що при зростанні розмірів змішаних кластерів доля важких атомів у них зменшується. Але чи зменшується при цьому кількість таких атомів? Тобто, чи можна описати змішані кластери, як ядро важких атомів вкритих оболонкою більш легких атомів, з приблизно однаковим за розміром ядром, але оболонкою різної товщини?

Зазначені зауваження не стосуються сутності роботи, основних висновків та наукових положень, що виносяться на захист, і не впливають на високу загальну оцінку дисертації О.П. Конотопа.

В якості загальної оцінки дисертації вважаю, що за актуальністю, новизною, рівнем і достовірністю отриманих наукових результатів та їх практичною значущістю дисертаційна робота О.П. Конотопа «Особливості структури та складу вільних двокомпонентних кластерів на основі інертних газів» відповідає вимогам МОН України до кандидатських дисертацій, зокрема пунктів 9, 11, 12 «Порядку присудження наукових ступенів», а її автор, О.П. Конотоп, заслуговує присудження вченого ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальності 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Офіційний опонент,
заступник директора з наукової роботи
Інституту сцинтиляційних матеріалів
НАН України,
доктор фізико-математичних наук



* О.В. Сорокін