

## ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

**Радченка Тараса Михайловича**

### **“Вплив упорядкування дефектної структури на транспортні властивості змішаних кристалів”**

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

Дисертаційна робота Т.М. Радченка виконана в актуальній області досліджень впливу різноманітних дефектів на транспортні властивості графену, а також передбаченню можливих впорядкованих розподілів атомів заміщення та втілення на вузлах і міжвузловинах гексагональної ґратки графену. Перші два розділи дисертації присвячено вивченню властивостей змішаних кристалів.

Вважається, що, коли до 2024 року згідно закону Мура напівпровідникові технології досягнуть характерного розміру в 7 нм, єдиним матеріалом для їхньої реалізації, імовірно, стане графен. Також графен вже застосовується у метрології у нових дешевших стандартах опору. Одним з найважливіших факторів для цих застосувань є саме розуміння механізму виникнення та впливу різноманітних дефектів на властивості графену. Слід відзначити, що, на сьогоднішній момент, домінантне джерело безпорядку, що обмежує якість транспортних та оптичних властивостей графену, все ще не встановлене. З огляду на це, тематика дисертаційної роботи Радченка Т.М. є, безумовно, важливою і актуальною.

Дисертація Радченка Т. М. складається зі вступу, шести розділів (оглядового, двох присвячених змішаним кристалам і трьох – графену), висновків та двох додатків.

Перший розділ дисертації має оглядовий характер і складається з двох підрозділів. У першому оглянуто літературні дані щодо кристалічних 3D структур за високих тисків і температур. У другому підрозділі розглядається 2D графенова (гексагональна) ґратка зі структурними дефектами у ній: точковими (домішкові атоми/адатоми, вакансії та їхні комплекси) і лінійними (протяжні: нанобрижі, атомові сходи чи тераси). Він написаний дуже вдало і дає повне уявлення про круг задач, розглянутих у дисертації.

У наступному, другому розділі розглянуто впорядкування щільноупакованих стопів. Зокрема, виведено одночастинкові ймовірнісні функції розподілу атомів у (над)структурі типу  $D0_{19}$  на основі ГЦП-ґратки, що уможливило позбутися наявної в літературі

неоднозначності щодо їхнього вигляду. Чисельно оцінено параметри міжатомних взаємодій (власні значення матриці енергій «змішання») та передбачено частину фазової діаграми для стопу Ti–Al.

У третьому розділі досліджено вплив тиску на (пере)розподіл атомів у щільнопакованих (ГЦК- і ГЦП-) стопах. Зокрема, показано, що, коли залежність об'єму стопу від параметра далекого атомного порядку є суттєвою, то зі зміною тиску змінюється не лише температура переходу порядок–безпорядок, а й стрибок параметра далекого порядку: він може як збільшуватися (добігаючи певного граничного значення), так і зменшуватися, залежно від знаків модельних параметрів.

У четвертому розділі побудовано статистично-термодинамічну та кінетичну моделі упорядкування атомів заміщення та втілення у гексагональній (графеновій) ґратці з урахуванням як короткосяжних, так і реалістичніших далекосяжних міжатомних взаємодій. Визначено ділянки значень енергетичних параметрів, що відповідають стабільним (над)структурам на графеновій основі.

У п'ятому розділі розглядається вже електронний, а не дифузійний, як у попередніх розділах, транспорт у графені. Автор досліджує вплив на нього різноманітних просторових конфігурацій та різних типів точкових дефектів. Його електротранспортні властивості розраховувалися на основі нестационарного методу Кубо–Грінвуда в прямому просторі, коли електропровідність визначається з часової динаміки хвильового пакету. Така методологія охоплює всі три (балістичний, дифузійний і локалізаційний) транспортні режими та є обчислювально-ефективною, дозволяючи виконувати комп'ютерні розрахунки для графенових систем, наближених до реалістичних. Розглянуті в дисертації графенові зразки містили 1,7 мільйонів вузлів, що відповідає площі  $\approx 210 \times 210 \text{ нм}^2$ , а максимальні розміри сягали  $\approx 500 \times 500 \text{ нм}^2$  (до 10 мільйонів вузлів). *Для порівняння, у роботі 2015 року інших авторів розмір зразку вже був  $94 \text{ мкм}^2$  (3.6 мільярдів вузлів). Такі великі розміри можливі через те, що фактично розглядається система електронів, які не взаємодіють.*

Останній, шостий розділ присвячено впливу орієнтаційної кореляції лінійних (1D) дефектів на електронний транспорт у графені. Також розглянуто випадок, коли одночасно присутні як 0D, так і 1D типів дефектів. Показано, що у випадку наявності в графені, окрім точкових дефектів, ще й лінійних (нанобрижів, атомових сходинок і/або терас), може, окрім зміни вигляду електронно-концентраційної

залежності провідності, виявлятися ряд нових ефектів: підвищуватися електропровідність у декілька разів за наявності орієнтаційної кореляції лінійних дефектів чи в сотні разів у випадку ще й упорядкування точкових, посилюватися анізотропія електропровідності та протидія чи, навпаки, сприяння електронно-дірковій асиметрії, яку спричиняють точкові дефекти. *Слід особливо відзначити актуальність цього розділу, бо саме такі дефекти виникають у деяких зразках графену, які зараз намагаються використовувати у стандартах опору з використанням квантового ефекту Холла.*

Повертаючись до загальної оцінки дисертації, підкреслюю, що результати, положення та висновки є науково обґрунтованими і, з точки зору достовірності, велика їхня частина не викликає сумніву. Основні наукові результати характеризуються необхідною новизною. Внесок автора в отриманні результати обговорюється, але деякі моменти вимагають уточнення (про це далі). Результати в повній мірі опубліковані в наукових спеціалізованих виданнях. Особливо відзначу, що серед них є публікації у таких високореєтингових журналах, як Physical Review B та Solid State Communications. Під час підготовки відгуку я знаходив цитування цих робіт у нових препринтах.

Положення автореферату і дисертації ідентичні. Сама дисертація і автореферат відповідають встановленим вимогам ВАК України.

Відзначаючи великий обсяг проведених досліджень і кваліфікований виклад результатів, потрібно зауважити, що дисертація має ряд недоліків, які заслуговують на обговорення.

Розпочнемо з зауважень, що мають більш загальний характер.

1. У дисертації використано результати, які також увійшли в нещодавно захищену (26 жовтня, 2015 р.) кандидатську дисертацію І.В. Сагаліанова "Електропровідність графену з різними розподілами дефектів заміщення та адсорбованих атомів". Зокрема, це публікація Т.М. Radchenko, V.A. Tatarenko, I.Yu. Sagalianov, Yu.I. Prylutskyu, Phys. Lett. A **378**, 2270 (2014), яка відповідає роботі 27 зі списку опублікованих праць автореферату Т.М. Радченка. Також, це п'ять робіт, а саме 16, 22, 24, 28 та 30, цитовані в авторефератах обох дисертацій. І.В. Сагаліанов, фактично, є учнем дисертанта. Тому вважається, що результати, які одержано в цих спільних статтях, можуть бути використані в обох

дисертаціях. Хоча особистий внесок здобувача детально пояснено в дисертації та авторефераті, проте варто було б більш конкретно пояснити, які саме результати увійшли в кандидатську дисертацію І.В. Сагалянова, а які - в докторську Т.М. Радченка.

2. У п'ятому розділі при обговоренні густини станів у графені варто було б навести точний аналітичний результат, одержаний у роботі J. P. Hobson and W. A. Nierenberg, *Phys. Rev.* **89**, 662 (1953) для випадку чистого графену, але з урахуванням зонної структури графену у наближенні найближчих сусідів. Цей вираз містить сингулярності ван Хофа при  $E = \pm u$  та  $E = \pm 3u$ .

На Рис. 5.4 б (слабкий дельта-подібний потенціал) ми бачимо, що на краях зони ( $E = \pm 3u$ ) є осциляції, які вочевидь є артефактом обчислення. Такі ж осциляції знаходимо на Рис. 5.13 а. Було б бажано додатково дослідити, як на ці осциляції впливає зміна розміру системи. Тоді б висновок про реальні осциляції густини станів на Рис. 5.4 д і 5.4 е для випадку великої концентрації ( $1/8$ ) домішок був би більш аргументованим. Це питання про осциляції стосується також Рис. 5.8 б.

Дещо більшу увагу було б варто звернути на розмиття сингулярностей ван Хофа при  $E = \pm u$ . Так вони присутні на Рис. 5.4 а (випадок сильного дельта-подібного потенціалу), але сильно розмиті на інших панелях цього рисунку. Наприклад, на Рис. 5.4 б (слабкий дельта-подібний потенціал) розмиття виглядає слабкішим. У той же час, у роботі [260] (S. Yuan, H. De Raedt, and M. I. Katsnelson, *Phys. Rev. B* **82**, 115448 (2010)), де використано майже такі ж чисельні методи, сингулярності ван Хофа розмиваються, але не настільки сильно.

Відзначу, що певну дискусію про розмиття сингулярності ван Хофа у випадку потенціала Гаусса для взаємодії з домішками на Рис. 5.4 в і г все ж вдалося знайти на с. 170 дисертації.

3. Але найбільш серйозним зауваженням я вважаю наступне. У роботі досліджуються транспортні властивості для так званого "впорядкованого розташування домішок" (див., наприклад, Рис. 3 в авторефераті, а також Рис. 5.4 д та 5.4 е (для DOS), Рис. 5.8 б (для DOS), Рис. 5.9 д та Рис. 5.9 е (дифузійність та провідність), Рис. 5.15 (провідність) у тексті дисертації). Також є Рис. 5.6 д - 5.6 є, які відповідають дещо іншій моделі. Придивившись, наприклад, до Рис. 5.9 г (або до Рис. 5.12), можна зрозуміти, що під впорядкованим розташуванням адатомів автор чітко розуміє періодичну надструктуру з одним атомом Нітрогену у примітивній елементарній комірці. Якби система була нескінченною, то можна було б застосувати теорему Блоха та навіть знайти розв'язок

аналітично. У Розділі 12 класичного підручника Ашкрофта та Мерміна "Фізика твердого тіла" пояснюється, що у періодичній ґратці розсіювальних центрів хвиля розповсюджується без затухання завдяки когерентній конструктивній інтерференції розсіяних хвиль. Оскільки в цьому розділі дисертації не розглядаються інші джерела затухання, такі як електрон-фононна взаємодія або взаємодія між електронами, то дослідження електричного опору для цього випадку не має сенсу. Зрозуміло, що чисельно затухання може виникати через скінченність розміру системи, а також через те, що деяке затухання вводиться безпосередньо в чисельні розрахунки. У такому випадку треба було б дослідити, як розмір системи та це додаткове затухання впливають на одержані результати. Безумовно, це зауваження стосується тільки "впорядкованого розташування домішок" і не дійсне для випадку, коли домішки розташовані неупорядковано.

4. Порівняння з експериментом у Розділі 5.5 виглядає недостатнім. Саме через важливість цього моменту в дисертацію було б варто включити більше експериментальних даних та прямих порівнянь з ними. Також розсіяння на домішках не є єдиним джерелом розсіяння, що впливає на електричний опір. Було б варто принаймні згадати вплив ріплів (брижів) на поверхні графену, роль електрон-фононої та електрон-електронної взаємодій.
5. Недостатню увагу в роботі приділено дослідженню режиму локалізації. У роботі (с. 161) відзначається, що саме дифузійному режиму присвячено головну увагу. Проте, знову ж таки, для перевірки надійності методу певну увагу було б варто присвятити відтворенню відомих чисельних результатів, які були одержані іншими авторами саме у режимі локалізації. Це зробило б більш надійними результати, одержані у режимі, коли провідність близька до  $2 e^2/h$ .
6. У роботі зустрічаються лінгвістичні неточності. Усюди такі терміни як "Больцманового", "Борновому" (с.8), "Діракова точка", "Гамільтоніян", "Ферміїва енергія" та ін. написані з великої літери, що відповідає англійському правопису.

Наведені зауваження можуть бути враховані при подальшій роботі автора. Вони не впливають на загальну позитивну оцінку роботи.

Враховуючи актуальність обраної теми, значний обсяг виконаних досліджень, наукову цінність та обґрунтованість отриманих результатів і рівень їх апробації, вважаю, що дисертація Т. М. Радченко “Вплив упорядкування дефектної структури на транспортні властивості змішаних кристалів” цілком відповідає всім вимогам МОН України щодо докторських дисертацій, а її автор Тарас Михайлович Радченко заслуговує на присудження йому наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Офіційний опонент

доктор фізико-математичних наук

завідувач лабораторії сильнокорельованих

низьковимірних систем

Інституту теоретичної фізики

ім. М.М. Боголюбова НАН України

С.Г. Шарапов

Підпис С. Г. Шарапова засвідчую:

Вчений секретар ІТФ ім. М.М. Боголюбова,

НАН України,

кандидат фізико-математичних наук



С. М. Перепелиця