

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу Реви Віталія Ігоровича **“Вплив вакансій на енергетичні характеристики електронів і позитронів у неперехідних металах та заряджених кластерах”**, подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла

Теорія плавлення Френкеля для твердих тіл передбачає стрибкоподібне збільшення концентрації вакансій у потрібній точці, а також зменшення енергії утворення вакансій зі зростанням їхньої концентрації. Рівноважна концентрація вакансій у термодинаміці розраховується при наявності енергії утворення вакансії, величина якої може бути отримана з даних позитронної анігіляційної спектроскопії.

Число заповнених і незаповнених кластерних орбіталей визначається числом атомів у кластері. Найбільшу стабільність мають кластери із повністю заповненими електронними оболонками (числа атомів у них відповідають так званим «магічним числам»). У заповнених сферичних оболонках кластерів з магічним числом атомів, верхні заповнені електронні енергетичні рівні є максимально виродженими. Наявність у кластері навіть однієї вакансії, як показано в дисертації, може привести до зміни магічних чисел атомів.

Зазначене дає підставу стверджувати, що наукові проблеми, які розглядаються, є актуальними і мають практичну цінність.

Метою дисертаційної роботи є теоретичне дослідження впливу вакансій на енергетичні характеристики позитронів у 3D-металах та металевих кластерах.

Сформульовані й розв’язані в дисертації задачі спрямовані на уточнення і розвинення теорій, які стосуються впливу вакансій на кінетику та енергетичні характеристики позитронів у 3D-металах, а також на енергетичні характеристики металевих кластерів. Робота дисертанта пов’язана з тематикою наукових робіт, що виконувались у Запорізькому національному технічному університеті („Розмірні електронні ефекти в металевих наноструктурах і нанодефектах металу”, „Теоретичне та експериментальне дослідження електронних ефектів в мікро- та наноструктурних матеріалах” та „Моделювання пристроїв, структур і матеріалів мікро- та наноелектроніки”).

Дисертація складається із чотирьох розділів і висновків.

Перший розділ присвячено огляду методів позитронної анігіляційної спектроскопії, та їхньому застосуванню для отримання інформації про дефектний стан та електронну густину металевих систем, а також про поведінку позитронів у металах з різним знаком роботи виходу. Мас-спектрометричні та калориметричні методи дослідження вільних кластерів, описані в ньому, дозволяють отримати вичерпну інформацію про енергетичні характеристики кластерів та їх іонів. Особливу увагу приділено методу функціоналу густини та його застосуванню для розрахунку профілів електронної густини, енергії дисоціації, когезії, потенціалу іонізації, спорідненості до електрона, ємності та енергії утворення моновакансії нейтральних та заряджених кластерів. Розділ закінчується формулюванням проблем та задач, на розв'язання яких спрямована дисертаційна робота.

Другий розділ присвячено дослідженню кінетики локалізації у вакансії інжектованого у метал позитрона із врахуванням особливостей його розсіювання в області вакансії. Виконано розрахунок ймовірності локалізації позитронів у моновакансіях Al, Cu та Zn як функції температури. Вважаючи, що енергія позитрона витрачається на збудження електронно-діркових пар, отримана формула швидкості локалізації позитрона у вакансії металу як функція його енергії. Для термалізованих позитронів обчислена температурна залежність швидкості локалізації.

Розглянуто цікавий режим розсіювання позитронів зворотної емісії (у металах з від'ємною роботою виходу) на приповерхневих вакансіях, які заряджені іншими, локалізованими, позитронами. Враховуючи, що поблизу поверхні металу концентрація вакансій підвищена, приповерхневі вакансії, заряджені позитронами, створюють двовірний "потенціальний бар'єр", який частково блокує і відбиває вільні низькоенергетичні позитрони назад в об'єм, де вони і анігілюють. Розрахунки дозволяють пояснити особливість в енергетичному розподілі позитронів зворотної емісії, яка спостерігається в експериментах.

У третьому розділі пропонується метод, у якому комбінуються самоузгоджені розрахунки моновакансії у металі без урахування зовнішньої поверхні та розрахунки в моделі стабільного желе для металу з однорідним об'ємом та плоскою поверхнею, але зниженою густиною атомів, зумовленою існуванням вакансій з відносною концентрацією c_v . Використовуючи c_v як малий параметр, усі енергетичні хара-

ктеристики металу розкладаються у функціональний ряд. Члени розкладу з нульовими ступенями c_v відносяться до бездефектного металу, а для розрахунку лінійних за c_v членів потрібні тільки характеристики бездефектного металу.

Пропонується також послідовна процедура знаходження потенціалу іонізації великого металевого кластера з радіусом $R_{N,v}$, який складається з N атомів та містить N_v вакансій. У наближенні ефективного середовища для енергії основного стану електронів побудована теорія збурень за малими параметрами $R_v/R_{N,v}$ та L_v/R_v (R_v та L_v – середня відстань між вакансіями та довжина розсіювання електронів на вакансії, відповідно). Отримані аналітичні залежності можуть бути корисні при проведенні аналізу результатів фотоіонізаційних експериментів та для визначення розмірної залежності концентрації вакансій, в тому числі, поблизу температури плавлення.

В четвертому розділі дисертації досліджено квантові розмірні ефекти у малих сферичних кластерах металів з вакансією у центрі. Повну енергію металевої сфери, з вакансією у центрі, представлено у вигляді функціоналу електронної густини. У результаті самоузгоджених розрахунків були отримані повні енергії, електронні розподіли, потенціальні профілі та значення енергії електронних станів для нейтральних, позитивно та негативно заряджених суцільних кластерів Rb_N , K_N , Na_N , Li_N , Mg_N , Al_N , ($N \leq 270$) та кластерів, що містять моновакансію у центрі.

На основі отриманих характеристик були проведені прямі обчислення та побудовані розмірні залежності потенціалу іонізації, спорідненості до електрону, електричної ємності, енергії когезії, енергії дисоціації а також енергії утворення вакансії за механізмами Шоткі та «видування» пухирця. Результати обчислень для кластерів Rb_N , K_N , Na_N , Li_N , Mg_N і Al_N ($N < 270$) порівняні з асимптотиками і результатами для бездефектних кластерів.

Закінчується робота загальними висновками.

Основні результати роботи опубліковано в дев'яти статтях у фахових вітчизняних та закордонних виданнях та апробовано на міжнародних наукових конференціях у Запоріжжі.

Автореферат повністю відображає зміст дисертації.

До найбільш важливих результатів дисертаційної роботи можна віднести:

1. У моделі стабільного желе вперше одержано вираз для залежності швидкос

- ті локалізації позитрона у вакансії від його енергії та температури металу.
2. Вперше дано інтерпретацію зсуву енергетичного розподілу позитронів зворотної емісії, що спостерігається в експериментах.
 3. Вперше розраховано квантово- розмірні залежності потенціалу іонізації, енергії спорідненості з електроном, електричної ємності, енергій когезії та дисоціації для заряджених малих кластерів із моновакансією та без неї.

До дисертаційної роботи слід зробити наступні зауваження:

1. В роботі розраховано швидкість локалізації позитрона у вакансії металу. Бажано було б сформулювати, хоча б якісно, умови локалізації позитрона у вакансії металу. Для цього можна було б використати відомі в теорії неупорядкованих систем критерії локалізації електронних станів. Однак в роботі цього не зроблено і навіть відсутні посилання на відповідні роботи.
2. В роботі не досліджено залежність швидкості локалізації позитрона у вакансії від концентрації вакансій у металі.
3. В роботі не обгрунтовано коректність моделювання кластеру у вигляді сфери, а не, наприклад, ікосаедру при розрахунку його характеристик.
4. На 119 сторінці дисертації у кінці третього знизу абзацу фраза «Більш того, таке “виплюскування” залежить від знаку надлишкового заряду кластера (див. 1). У зв’язку з цим,» містить недійсне посилання.
5. Посилання на деякі рисунки (зокрема рисунок 1.13) зустрічаються у тексті лише після самих рисунків.
6. На багатьох рисунках сімейства характеристик представлень в кольорі, що ускладнює копіювання матеріалу.
7. У тексті присутні русизми (задача вирішується замість розв’язується, рівна «Т» замість дорівнює «Т»).

Однак зазначені зауваження не впливають на загальну високу оцінку дисертаційної роботи, достовірність її результатів та обгрунтованість висновків.

Достовірність результатів роботи і обгрунтованість висновків забезпечуються використанням фізично прозорих моделей, порівнянням розрахунків з результатами більш точних методів для аналогічних випадків, а також з результатами експериментальних досліджень.

Робота є завершеним науковим дослідженням.

Результати роботи є значним внеском у розвиток теорії низькорозмірних металевих систем і можуть бути використані для розробки фізичних основ новітніх технологій.

Виходячи з вищенаведеного вважаю, що дисертаційна робота Реви Віталія Ігоровича **“Вплив вакансій на енергетичні характеристики електронів і позитронів у неперехідних металах та заряджених кластерах”** повністю відповідає всім вимогам «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24.07.2013 № 567, які висуваються до кандидатських дисертацій, а її автор заслуговує присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Старший науковий співробітник
Інституту високих технологій
Київського національного університету
ім. Тараса Шевченка,
доктор фізико-математичних наук, професор

 С. П. Репецький

