

ВІДГУК

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

Дисертація Реви В. І. є теоретичним дослідженням енергетичних характеристик позитронів та електронів у металах та заряджених металевих кластерах, що містять вакансії.

У сучасних технологіях, де використовуються наноматеріали, атомні кластери, або острівцеві плівки, існує необхідність діагностики, контролю дефектів та визначення енергетичних характеристик. Розрахунки таких характеристик, як потенціал іонізації, спорідненість до електрона, енергія когезії, енергія дисоціації та енергія утворення вакансій можуть бути використані для контролю дефектів і температури плавлення малих металевих частинок. Вони необхідні також при моделюванні композиційних інструментальних матеріалів, при розробці металізованих і клейових покриттів тощо.

За своєю природою позитрони чутливі до дефектів в об'ємі середовища і можуть використовуватися для визначення як їх типу, так і їх концентрації. Крім того, позитрони взаємодіють із поверхнею твердого тіла різним чином, внаслідок цього стають цінним інструментом дослідження фізики поверхні. Позитронна анігіляційна спектроскопія, яка базується на використанні пучків моноенергетичних позитронів, на сьогодні є одним із кращих методів розв'язання цієї задачі.

Із вищезазначеного можна робити висновок, що проблемі і задачі, які розглядаються в дисертації, є вельми актуальними.

Використовуючи і частково модифікуючи існуючі теоретичні методи дисертант досліджує кінетику локалізації у вакансії інжектованих у метал позитронів, а також вивчає енергетичні характеристики металевих кластерів. Здійснені ним доповнення дозволили врахувати вплив екранування позитрона електронами при його локалізації та передбачити зміну зсуву основного стану електронів у кластері, зумовлені наявністю вакансії.

Структурно дисертація складається зі вступної частини, одного оглядового і трьох оригінальних розділів, які закінчуються загальними висновками. Розглянемо окремо кожен з них.

Перший розділ містить три частини.

Спочатку приведено методи позитронної анігіляційної спектроскопії та їхнього застосування для отримання інформації про дефектний стан і електронне оточення металевих систем, а також про поведінку позитронів у металах з різним знаком роботи виходу.

У другій частині розділу проведено огляд мас-спектрометричних та калориметричних методів дослідження вільних кластерів. Описані в ньому

методи дозволяють отримати вичерпну інформацію про енергетичні характеристики кластерів та їх іонів.

Третя частина присвячена 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.

У другому розділі досліджено кінетику локалізації у вакансії інжектованого у метал позитрона. Вважаючи, що енергія позитрона витрачається на збудження електронно-діркових пар, отримано формулу для опису швидкості локалізації позитрона у вакансії металу як функцію його енергії. Виконано розрахунок ймовірності локалізації позитронів у моновакансіях Al, Cu та Zn як функції температури. Для термалізованих позитронів обчислена температурна залежність швидкості локалізації. Вперше розглянуто додатковий вплив заряджених позитронами вакансій поблизу поверхні на зворотну емісію позитронів з металу. Показано, що причиною зсуву енергетичного розподілу при зворотній емісії позитронів, виявленого у експериментах, є блокада – «відбиття»' низькоенергетичних позитронів вакансійним бар'єром назад у об'єм, де вони у подальшому анігілюють.

У третьому розділі пропонується метод, в якому комбінуються самоузгоджені розрахунки характеристик металу в присутності моновакансії без урахування зовнішньої поверхні металу та розрахунки для «штучного» металу з однорідним об'ємом та пласкою поверхнею, але зниженою густиною атомів, зумовленою існуванням дірок-вакансій з відносною концентрацією c_v .

Запропоновано також послідовну процедуру знаходження потенціалу іонізації великого металевого кластера. Представлений підхід є перспективним для експериментального визначення концентрацій точкових дефектів або домішок в кластерах металів. Для цього попередньо потрібно розрахувати довжину розсіювання електронів на відповідному дефекті в 3D-металі. Зокрема, може бути вирішене питання про концентрацію вакансій в кластері при температурі плавлення.

В четвертому розділі методом Кона-Шема в моделі стабільного желе виконані самоузгоджені обчислення профілів радіальних розподілів електронів і потенціалів суцільних кластерів та кластерів з вакансією. Це дозволило вперше визначити повну енергію нейтрального і зарядженого дефектного кластера, на основі чого проведено прямі обчислення енергій дисоціації, когезії, утворення вакансії, спорідненості електронів і потенціалу іонізації, а також електричної ємності. Результати обчислень для Rb_N , K_N , Na_N , Li_N , Mg_N і Al_N ($N < 270$) порівняні з асимптотиками і результатами для бездефектних кластерів.

До позитивної особливості рецензованої дисертації належить широке використання дисертантом фізичних моделей, завдяки чому всі розрахунки

доводяться «до числа» і проводяться оцінки величини ефекту для різних металів. Також там, де є така можливість, проводиться порівняння з експериментом. Це вселяє довіру до результатів теорії.

Істотних недоліків у оформленні дисертації не помічено. Але є деякі зауваження:

1) Позитрони, які інjektуються в метал, частково анігілюють, частково релаксують і локалізуються на вакансіях, а частково повторно емітують із металу у вакуум. Скільки яких позитронів задіяно у кожному з названих процесів визначає функція розподілу позитронів за швидкостями. Її потрібно було б знайти із розв'язку відповідного квантового кінетичного рівняння. Дисертант це питання обходить.

2) Досліджуючи енергетичні характеристики кластера, дисертант вважає кластер сферичної симетрії з періодичним радіальним розподілом як атомів матриці, так і вакансій (але різних періодів). При цьому вакансії моделюються прямокутною потенціальною ямою з радіусом комірки Вінгера-Зейтца. Така серйозна ідеалізація картини вимагає обговорення того, що прийнята модель враховує, а що ігнорує. Ціна таких модельних теоретичних досліджень сильно б виросла, якби вони проводилися спільно з експериментом.

3) Трапляються окремі огріхи в оформленні дисертації. Наприклад, на стор. 102 у кінці другого абзацу фраза «... змушує нас акцентувати увагу на межі застосування виразу (61) більш детально...» містить недійсне посилання.

Крім того, у підписах до рисунків використовуються різні форми подачі інформації про рисунки (то підписи під рисунками, то перед). Наприклад, рис. 1.1 і 1.3 та 1.4 і 1.5.

Достовірність роботи забезпечується тим, що вона ґрунтується на результатах добре відомих теоретичних моделей, які в роботі набувають уточнень і розвитку, а також непоганим узгодженням із експериментами.

Тематика роботи пов'язана із науковими роботами, які виконувалися в ЗНТУ: „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”.

Результати роботи апробовані на Всеукраїнських і міжнародних конференціях і опубліковані в 9 фахових виданнях. Автореферат адекватно відображає зміст дисертації.


Підводячи підсумок, треба підкреслити, що дисертантом Ревою В. І. виконано значний обсяг робіт: зроблено критичний огляд літератури, виправлено неточності попередніх теорій, надано інтерпретацію експериментально виявлених особливостей у енергетичному розподілі позитронів зворотної емісії. Дисертація є закінченою науковою роботою, що містить нові обґрунтовані результати з розрахунку ймовірності локалізації позитрона у вакансію металу та енергетичних характеристики металевих

кластерів, що містять вакансії. Ці результати дають внесок у розвиток сучасних нанотехнологій та дефектоскопії наноматеріалів.

Вважаю, що з огляду на актуальність, новизну і практичне значення отриманих результатів, дисертаційна робота Реви Віталія Ігоровича «Вплив вакансій на енергетику електронів та позитронів у неперехідних металах і заряджених кластерах» повністю відповідає всім вимогам «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженому постановою Кабінету Міністрів України від 24.07.2013 № 567, які висувають до кандидатських дисертацій, а її автор заслуговує присудження йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Офіційний опонент

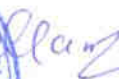
**доктор фізико-математичних наук,
член-кореспондент НАН України,
завідувач відділу теоретичної фізики
Інституту фізики НАН України**



П. М. Томчук

Підпис доктора фізико-математичних наук, члена-кореспондента НАН України, завідувача відділу теоретичної фізики Інституту фізики НАН України Томчука П. М. засвідчую:

**Вчений секретар ІФ НАН України
кандидат фізико-математичних наук**



В.С. Манжара