

ВІДГУК ОФІЦІЙНОГО ОПОНЕНТА

на дисертаційну роботу Величка Олега Володимировича

“Застосування квантових ґраткових моделей для опису систем з адсорбованими чи інтеркальованими частинками та оптичних ґраток”
подану на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук
за спеціальністю 01.04.07 — фізика твердого тіла

Дивовижна епоха макроскопічних вірусів і субмікронних/нанорозмірних частинок з ненасиченими валентними зв'язками з одного боку випробовує людство, а з іншого відкриває нові можливості їх практичного застосування в медицині, в сучасній функціональній електроніці та елементах живлення.

Одним зі способів створення складних атомно-молекулярних комплексів (клатратів) є конфігурації «господар-гість», в яких можна досягати не тільки спрямованої зміни вихідної атомно-молекулярної структури та силових полів матеріалів-«господарів», але і формувати на атомно-молекулярному рівні певні структури, або цілі функціональні блоки.

В ролі «ґраток господарів» важко знайти ґратки, кращі за шаруваті напівпровідники, в об'ємі яких інтеркаляцією можна створювати складні атомно-молекулярні комплекси, нанооб'єкти і наноструктури, різні за розмірністю, з контрольованою геометрією. Архітектури створені інтеркаляцією напівпровідникових матеріалів-«господарів» супрамолекулярними «гостями» дозволяють уникнути невідповідності між функціональними можливостями традиційних наноматеріалів і наноструктур та інтенсивним розвитком наноінженерії (квантова когерентна спінтроніка, нанофотоніка), а також невідкладними задачами створення надвисокоемких молекулярних накопичувачів енергії. Саме це змушує звернути підвищену увагу власне до супрамолекулярних структур як об'єктів, з якими часто пов'язують можливість реалізації унікальних фізико-хімічних властивостей, почасти – парадоксальних. В усіх супрамолекулярних структурах рецептор («господар») містить молекулярні центри налаштовані на селективне зв'язування певного визначеного субстрата («гостя») за так званим принципом «замок-ключ». А тому інтеркаляційний метод з одного боку підвищує синтетичну варіабельність супрамолекулярних систем, з іншого, відкриває можливість формування ієрархічно-фрактальних супрамолекулярних архітектур, дуже актуальних для формування функціонально гібридних сенсорних давачів нового покоління. На базі шаруватих напівпровідників формування таких архітектур вимагає правильного врахування сильних локальних кореляцій зумовлених багаточастинковими взаємодіями в системі «господаря», «гостя» та «господаря» – «гостя», беручи до уваги основні особливості кристалічної структури шаруватих кристалів, і закономірності заповнення та впорядкування інтеркалянта, як наприклад у випадку сегнетовпорядкованих диполів у Ван дер Ваальсових щілинах. Це може призводити до незвичних властивостей

інтеркалатів, таких як фазове розшарування, поява сегнетовпорядкованих фаз, зв'язку між фотоелектричними процесами та електретним ефектом.

Отже, дуже вагомим є вивчення різних за типом інтеркалатів (шаруватий кристал з впровадженням у нього інтеркалянта) в рамках єдиного підходу, поєднуючи простоту опису й належне відображення основних фізичних процесів, що відбуваються у згаданих системах.

Тому, з точки зору важливості розуміння фізичних процесів, які відбуваються в системах «господар» – «гість», розвиток уніфікованого мікроскопічного опису сильноскорельованих ґраткових систем у рамках квантових ґраткових моделей і дослідження на цій основі їх термодинамічних і динамічних властивостей під дією ефективних зовнішніх полів є завдання *актуальне і дуже перспективне*.

Дисертація О.В. Величка складається з вступу, семи розділів, висновків та списку використаних джерел. У вступі автор висвітлює стан проблем, актуальність досліджень, сформульовано поставлені задачі та виділено наукову новизну і практичне значення одержаних результатів.

У першому розділі наведено короткий огляд літератури щодо досліджуваних систем, де вказано як їх практичне застосування та фізичні особливості, так і перераховано найважливіші теоретичні підходи щодо їх опису, а також перераховано наявні труднощі та нерозв'язані проблеми.

Оригінальна частина роботи умовно може бути розділена на дві частини. Перша частина присвячена інтеркалатам (проінтеркальованим шаруватим кристалом), зокрема нікелевим інтеркалатам GaSe та InSe. Для них вперше якісно описано виникнення електретного ефекту у рамках модифікованої моделі Блюма–Емері–Гріффітса. Для літєвого інтеркалату анатазу вперше показано, що впорядкування літію пов'язано з виникненням деформації в системі; в моделі ґраткового газу досліджено термодинамічну стійкість інтеркалату та виявлено умови фазового розшарування на бідну та багату літєм фази. У гексагональній ґратці зі структурою графену в рамках двостанової моделі Бозе–Хаббарда вперше досліджено появу збуджень фононного типу й можливість появи модуляції в системі та їх вплив на бозеконденсацію і динамічні характеристики системи локальних подвійних потенціальних ям.

В другій частині вперше запропоновано деформовну модель Блюма–Емері–Гріффітса, яка враховує мікроскопічний механізм впливу прикладеного всестороннього тиску на термодинаміку кристалів з багатоямними локальними ґратковими потенціалами. На прикладі сегнетоелектрика сімейства $\text{Sn}_2\text{P}_2\text{S}_6$, отримано добру кількісну збіжність з експериментальними результатами. Вперше проведено симетрійний аналіз і сформульовано розширену модель Міцуї, яка дозволяє вивчати як сегнетовпорядкування, так і вплив зовнішнього електричного поля у довільних напрямках, що дозволило пояснити експерименти з прикладанням поперечного поля до кристалів типу сегнетової солі.

На основі отриманих у роботі результатів: запропоновано опис електретного ефекту у інтеркальованих нікелем селенідах індію та галію та відтворена

пікоподібна структура температурних залежностей діелектричної проникливості інтеркальованих зразків; в інтеркальованому літієм анатазі встановлено можливість виникнення внутрішнього п'єзоефекту (деформація ґратки поєднується з впорядкуванням антисегнетоелектричного типу); встановлено значення модельних параметрів, що відповідають літійованому анатазу, а також можливість фазового розшарування на бідну та багату фази; виникнення стадійного впорядкування в шаруватих кристалах веде до перебудови спектру електронних збуджень. Зокрема, виникають додаткові гілки спектру, сумарне число яких рівне числу шарів у пакеті. Залежність кривих дисперсії від поперечних компонент хвильового вектора та поздовжньої складової має свої особливості. Досліджено зонний спектр бозе-атомів у двовимірних гексагональних оптичних ґратках із структурою типу графену та визначено частотні залежності одночастинкових спектральних густин для обидвох підґраток в залежності від розміщення рівня хімічного потенціалу, величини щілини у зонному спектрі та температури. Отримано температурно залежний безщілинний спектр з точками Дірака на краю зони Бріллюена. Хімічний потенціал розташований у цьому випадку поза дозволеною енергетичною зоною. При відмінності між енергіями частинок на вузлах різних підґраток, коли виникає щілина у спектрі, хімічний потенціал може перебувати між підзонами. У такому разі має місце значна перебудова зонного спектру. Визначено частотні залежності одночастинкових спектральних густин для обидвох підґраток в залежності від розміщення рівня хімічного потенціалу, величини щілини у зонному спектрі та температури. Крім того, на основі запропонованого підходу описано ряд явищ, та отримано добру кількісну збіжність з експериментальними результатами для кристалів з багатоямними локальними ґратковими потенціалами; для інтеркальованих шаруватих кристалів вдалось отримати умови фазового розшарування літію на бідну та багату фази в інтеркальованому анатазі; відтворити пікоподібну структуру температурних залежностей діелектричної проникливості інтеркальованих зразків та умови виникнення електретного ефекту.

Робота виконувалась за постійної підтримки корифея теоретичної фізики та фізики твердого тіла член-кореспондента НАН України, професора Ігора Васильовича Стасюка, який вмів виокремити головне від другорядного для кожної фізичної задачі й підказати шлях її виконання. Результати досліджень опубліковані в журналах: *Phase Transitions*, *Cond.Mat.Phys.*, *Theor&Math. Physics*, *Ferroelectrics*. Тому достовірність і обґрунтованість наукових результатів даної роботи не складає жодних сумнівів.

Однак при уважному ознайомленні з роботою виникло кілька зауважень.

1. Концентрація нікелю, інтеркальованого в селеніди галію й індію, є надто низькою, щоби він міг за рахунок самого лише впорядкування викликати електретний ефект у даній системі. Тому запропонований у другому розділі теоретичний підхід радше описує спусковий механізм типу «лад-безлад», який є лише частиною процесу виникнення електретного ефекту. Інші складові процесу залишились у тіні. Це може, наприклад, бути

електронна підсистема й тоді слід би використати складнішу модель на зразок псевдоспін-електронної.

2. При дослідженні інтеркаляції складних частинок у пакетно-впорядковані шаруваті кристали (четвертий розділ) замість модельного гаусового розподілу для густин електронних станів інтеркальованих частинок доцільніше було б використовувати напівеліптичний розподіл, який має чіткі границі зони й, відповідно, реалістичніший.
3. Винесені у назву дисертації адсорбовані частинки досить побіжно згадуються в рамках застосування моделі Бозе–Хаббарда, але основний наголос зроблено на оптичних ґратках. Хоча дана модель (особливо в застосованому наближенні жорстких бозонів) є цілком придатною для опису систем з адсорбованими частинками.

Слід зазначити, що дані зауваження не мають принципового характеру й не знижують наукового значення дисертації.

Основні результати дисертаційної роботи опубліковано у відповідних розділах 2 монографій і 15 статтях у фахових наукових виданнях (статті [3–5, 7–10, 15–17] зі списку публікацій здобувача належать до третього квартилю за SCImago з кратністю два згідно Наказу МОН України № 1220 від 23.09.2019, тобто загальне їх число еквівалентне 25) і 22 тез міжнародних конференцій.

На підставі вищевикладеного вважаю, що дисертаційна робота Величка Олега Володимировича “Застосування квантових ґраткових моделей для опису систем з адсорбованими чи інтеркальованими частинками та оптичних ґраток” є завершеною науково-дослідницькою роботою, яку виконано на високому науковому рівні із застосуванням сучасних теоретичних методів. За рівнем, актуальністю, новизною, об’ємом дисертація відповідає вимогам п. 10 «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженого постановою Кабінету Міністрів № 567 від 24.07.2013 зі змінами, а її автор Величко Олег Володимирович заслуговує присудження йому наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 — фізика твердого тіла.

Офіційний опонент:

старший наук.співр.
доктор фіз.-мат.наук,
професор



Н.К. Товстюк

Підпис Н.К. Товстюк підтверджую:

Взятий секрет



Р.Брилевський