

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертацію Солодкого Миколи Степановича
“Багатохвильові спектри розсіяння X-променів та електронів
у складних кристалічних з’єднаннях”,
представлену на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-
математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла

Актуальність теми дослідження

На даному етапі розвитку методів структурної діагностики матеріалів основний об’єм інформації про структурну досконалість кристалів дають дифракційні методи, зокрема, електронна мікроскопія та дифрактометричні методи з використанням X-променевого і синхротронного випромінювання. Аналіз X-променевих та електронних дифрактограм дозволяє дослідити їх деформаційні поля не тільки якісно, але і провести кількісну оцінку. Зокрема, використання багатохвильової X-променевої дифракції дозволяє отримати кількісні значення параметрів ґратки і, відповідно, побудувати тензор деформації.

Водночас, у зв’язку із стрімким розвитком комп’ютерних методик обробки даних, при дослідженні напівпровідникових гетероструктур чи багат шарових нанокристалічних систем стали переважати моделювання дифракційних спектрів і одержання із них структурних характеристик на основі порівняння експериментальних і розрахункових кривих. Для дослідження внутрішнього розподілу деформацій, стехіометричного складу і характеру багатокомпонентних фаз на границях розділу необхідно здійснювати комплексні експериментальні та комп’ютерні моделювання процесів розсіяння X-променів із врахуванням прямих і обернених задач. Тому, накопичення і систематизація розрахункових та експериментальних даних про процеси багатохвильового розсіяння X-променів є актуальним і важливим у фізиці напівпровідників та нанотехнологій.

На даний час, досить актуальними є дослідження реальних кристалів за допомогою дифракції зворотньо-розсіяних електронів. Перспектива таких досліджень зумовлена, по-перше – локальністю методу (можливість отримувати дифракційні зображення від локальних областей зразка розмірами декілька нанометрів), по-друге – метод володіє широким діапазоном чутливості до структурних порушень кристалічної ґратки, зокрема, дає можливість визначати величини деформацій у різних кристалографічних напрямках для різного роду моно- і полікристалів. Однак, закономірності формування електронних дифрактограм потребують додаткового вивчення, а однозначна інтерпретація їх дифракційних зображень викликає певні труднощі.

Тому, у дисертації особлива увага приділяється апробації нової методики аналізу дифракційних зображень, що отримані за допомогою методу Кікучі. Використання при аналізі картин дифракції параметрів енергетичного спектру Фур’є-перетворення дозволило дослідити деформаційний стан поверхні кристалів, що безумовно є актуальним, оскільки даний підхід може слугувати додатковим інструментом для підтвердження достовірності даних, отриманих за допомогою інших методів

дослідження.

Актуальність представленої роботи Солодкого М.С. підтверджується також тим, що дослідження виконані у відповідності до програми наукової тематики кафедри інформаційних технологій та комп'ютерної фізики Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича та у межах координаційної програми МОН України “Нові підходи у розвитку структурно-чутливої X-променевої спектроскопії та дифрактометрії складних кристалічних сполук, тонкошарових та нанорозмірних шаруватих систем” (номер державної реєстрації 0119U100731).

Обґрунтованість та достовірність наукових висновків дисертації Солодкого М.С. забезпечені поєднанням комплексу взаємодоповнюючих сучасних методів дво- та багатохвильової X-променевої дифрактометрії, скануючої електронної мікроскопії, катодолюмінісцентної спектроскопії, та засобів математичного моделювання і обробки отриманих результатів. Добра узгодженість результатів між собою та несуперечність їх результатам досліджень інших авторів у цьому напрямку підтверджує надійність отриманої у роботі нової інформації. Всі основні результати і висновки добре аргументовані, а теоретичні розрахунки у цілому підтверджуються відповідними експериментальними даними.

Серед отриманих **основних результатів** варто відзначити наступні:

1. Запропоновано метод для визначення параметрів ґратки в гетероструктурах та багатошарових системах (на прикладах $Al_xIn_{1-x}Sb$ та $Zn_{1-x}Mn_xSe$ відповідно) із використанням кінематичного представлення багатохвильової X-променевої дифракції. При цьому, для зменшення впливу інструментальних факторів на точність вимірювання, використано випадки компланарної і некомпланарної X-променевої дифракції.

2. Визначено ступінь тетрагонального спотворення ґратки епітаксialного шару $Zn_{1-x}Mn_xSe$. Внаслідок анізотропних напружень при переході кубічної структури шару в тетрагональну показано динаміку зміни місцеположень трихвильових структурно-еквівалентних рефлексів $(006, \bar{5}15/\bar{5}11)$ і $(006, \bar{1}\bar{3}5/\bar{1}\bar{3}1)$.

3. Запропоновано спосіб підвищення точності визначення деформацій шляхом мінімізації впливу інструментальних факторів за рахунок попередньої обробки зображень Кікучі.

4. Використовуючи дані, отримані за допомогою параметрів енергетичного Фур'є-спектру при аналізі картин Кікучі на додаток до методу дискретного двовимірного Фур'є-перетворення, досліджено локальні деформації і їхній характер анізотропії у різних кристалографічних напрямках для кристалів Ge:Sb та штучного алмазу.

5. Проведено кластеризацію в просторі параметрів деформацій серії кристалів алмазу методом k-середніх з використанням евклідової відстані між точками в системі координат (σ_e, M_e) , а також досліджено вплив умов вирощування кристалів на їх характеристики.

В дисертації проведено комплекс теоретичних та експериментальних досліджень багатохвильових спектрів розсіювання X-променів та електронів у різних

кристалічних системах, що суттєво розширює розуміння розглянутих явищ та вказує на **важливість результатів роботи** для наукових досліджень.

Практична значимість роботи полягає у тому, що автором запропоновано оптимальні склади та необхідні умови для реалізації випадкової компланарної/некомпланарної дифракції в сполуках $Al_xIn_{1-x}Sb$ та $Zn_{1-x}Mn_xSe$. Це дозволяє з високою точністю визначати кількісні значення параметрів ґратки і побудувати тензор деформації. Зокрема, базуючись на теоретичних розрахунках, показано можливість використання синхротронного випромінювання при дослідженні анізотропії періоду ґратки при будь-якому процентному співвідношенні домішки у твердому розчині $Al_xIn_{1-x}Sb$.

В роботі приділено значну увагу аналізу картин Кікучі. Запропоновано нову методика визначення середньоквадратичних деформацій, встановлено взаємозв'язок параметрів енергетичного Фур'є-спектру з величинами деформацій. Створено програмні пакети для обробки зображень смуг Кікучі та для побудови карт просторового розподілу деформацій кристалів у вигляді тривимірної поверхні, а також у вигляді ліній рівня. Це спрощує порівняльний аналіз просторового розподілу деформацій.

Отримані в роботі підходи та висновки можуть бути використані на підприємствах, які займаються вирощуванням шаруватих структур, отриманням розглянутих в роботі матеріалів чи їх сертифікацією, а також в освітньому процесі при читанні відповідних курсів студентам закладів вищої освіти.

Повнота викладення наукових положень та висновків в опублікованих працях. Основні результати дисертації у повному обсязі опубліковані у 17 працях, зокрема в 7 статтях у фахових наукових журналах (6 з них опубліковано у журналах, які внесені до реєстру міжнародних наукометричних баз Scopus та/або Web of Science, серед них 2 – у наукових періодичних виданнях іноземних держав). Матеріали дисертації доповідались на міжнародних та всеукраїнських конференціях. Обсяг друкованих робіт та їх кількість відповідають вимогам МОН України щодо публікації основного змісту дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук.

Автореферату у повній мірі відображає основний зміст дисертації.

Поряд із цікавими з наукової та прикладної точок зору результатами, до роботи є ряд **зауважень та запитань**:

1. З багатохвильових спектрів для досліджуваних складних твердих розчинів параметри ґраток визначені з досить високою точністю (до п'ятого знаку після коми в ангстремах). Проте, в роботі не вказано, чи здійснювалася стабілізація температури при проведенні досліджень, як можуть впливати різного роду дефекти на формування багатохвильових спектрів, та яким чином наявність дефектів вплине на точність визначення параметрів кристалічної ґратки?

2. Форма і структура максимумів на кривій гойдання для відбивання (224) зразка Ge:Sb дає не повну інформацію про кристалічну структуру. Для забезпечення

однозначності і коректності отриманих значень деформацій, розмірів кристалітів, густини дислокацій і т.п. необхідно аналізувати кілька відбивань.

3. Як впливає попереднє фільтрування зображень на точність визначених з них параметрів кристалічної структури і чи не могло зазначене фільтрування привести до часткової втрати інформації. Це ж питання стосується коректності визначення рівня фону дифракційних зображень?

4. Як відомо, коректність отриманих результатів суттєво залежить від підготовки до аналізу зразків, однак, в роботі нічого не сказано про попередню підготовку зразків перед отриманням експериментальних картин дифракції зворотно розсіяних електронів, та які методи для підготовки поверхні при цьому були використанні?

5. У тексті дисертації зустрічаються окремі граматичні помилки та стилістичні неточності.

Вказані зауваження не знижують наукової цінності роботи та не стосуються її новизни та основних висновків і результатів.

Таким чином, вважаю, що дисертація Солодкого Миколи Степановича “Багатохвильові спектри розсіяння X-променів та електронів у складних кристалічних з’єднаннях” за своїм науковим рівнем, актуальністю виконаних досліджень, об’ємом та практичним значенням є завершеною науковою роботою в рамках поставлених мети і завдань, а отримані в ній результати є новими і науково обґрунтованими. Дисертація повністю відповідає спеціальності 01.04.07 – фізика твердого тіла та задовільняє всім вимогам МОН України щодо кандидатських дисертацій, а її автор – Солодкий Микола Степанович – заслуговує присвоєння наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук.

Офіційний опонент

доктор фізико-математичних наук, професор,
професор кафедри матеріалознавства і новітніх технологій
ДВНЗ «Прикарпатський національний університет
імені Василя Стефаника»


І. П. Яремій

