

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу Шкирти Ігоря Миколайовича "Дослідження дисперсійних залежностей фононного спектру складних кубічних кристалів в концепції надпросторової симетрії", представлену на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10- фізика напівпровідників і діелектриків

Відомо, що перовськіти вважаються перспективними матеріалами для робочих елементів різноманітних пристроїв, зокрема, в якості сегнетоелектричних підкладок, що використовуються в комірках пам'яті сучасних енергонезалежних та універсальних електронних запам'ятовуючих пристроїв. Багато фізичних властивостей структурних модифікацій перовськітів залежать від складу і структури, тому для подальшого ціленаправленого пошуку таких сполук із заданими характеристиками актуальною задачею є накопичення знань про залежність "склад-структура-властивість", що важливо також і для вивчення природи структурних фазових переходів застосовно до об'єктів дослідження. Зазначимо, що в літературі відомостей про характеристики не класичних структур перовськітів та складних систем сімейства перовськіту небагато. Тому дослідження, в яких створюються універсальні методики розрахунків різних властивостей кристалів та систем твердих розчинів сімейства перовськіту, зокрема коливних спектрів при врахуванні різних механізмів композиційного впорядкування і модуляції силових постійних в концепції надпросторової симетрії, є мотивованим завданням. Аналіз сучасної наукової літератури свідчить про актуальність теоретичного дослідження фононних спектрів складних кристалів шляхом проведення їх модельних розрахунків. Таким чином, на нашу думку, тема дисертаційної роботи Ігоря Миколайовича Шкирти "Дослідження дисперсійних залежностей фононного спектру складних кубічних кристалів в концепції надпросторової симетрії" є важливою й актуальною.

Дисертаційне дослідження виконувалося на кафедрах фізики напівпровідників і прикладної фізики та в науково-дослідному інституті фізики і хімії твердого тіла ДВНЗ "Ужгородський національний університет" у відповідності до галузевих тем. Відзначимо, що дисертаційна робота за структурою і викладом відповідає вимогам ДАК МОН України. Автор вдало спланував структуру дисертаційної роботи, яка складається зі вступу, п'яти розділів, висновків, списку цитованої літератури та семи додатків.

У роботі об'єктом досліджень вибрано фононну підсистему кристалів, для якої можна сформулювати поняття протокристалу, вибрати основний стан коливної системи як суперпозицію фононної системи протокристалу, що збурюється "масовим" псевдопотенціалом, а універсальне силове поле міжатомної взаємодії розглядається в різних наближеннях. Запропоновану схему структурного ускладнення проведено для кристалів кубічної сингонії з $(2a \times 2a \times 2a)$ -надграткою типу BaTiO_3 , природних $(2a \times 2a \times 4c)$ -надграток типу $\text{BaSrTi}_2\text{O}_6$, кристалів та перовськітних твердих розчинів типів $(A_{0.5}^I A_{0.5}^{II})\text{BO}_3$, $A(B_{0.5}^I B_{0.5}^{II})\text{O}_3$ і $(A_{0.5}^I A_{0.5}^{II})(B_{0.5}^I B_{0.5}^{II})\text{O}_3$, що дозволило одержати трансформаційні співвідношення для дисперсійних залежностей фононів й провести детальний аналіз їх особливостей.

У першому розділі наведено основні положення концепції надпросторової симетрії; приведено систематику та узагальнений опис $(3+d)$ – мірних ґраток кристалів з $(2a \times 2a \times 2a)$ -надграткою. Відзначено, що різні узагальнення симетрії базуються на тому, що три змінні залишаються геометричними координатами простору, а четверта і вище мають інший фізичний зміст. Вказано на те, що врахування внутрішніх ступенів вільності геометричних об'єктів пов'язано з введенням у теорію симетрію груп

сплетіння, а при симетрійному описі модульованих кристалів виникає необхідність поряд з описом ґратки протокристалу описувати поле фізичного збурення. Зазначено, що опис фізичного поля при наборі базових векторів і груп симетрії основної ґратки може бути здійснений шляхом введення векторів модуляції q та модуляційних функцій $U_\alpha(n,j,q)$, а набір векторів модуляції q може розглядатися як додаткові негеометричні змінні. Тоді повний опис модульованого кристалу може бути проведено шляхом введення $(3+d)$ -мірного простору, який є векторною сумою $V_3 \oplus V_d$ трьохмірного (позиційного) протокристалу (V_3) і d -мірного внутрішнього (“фазового”) (V_d) підпросторів.

У другому розділі сформульовано схему розрахунку динаміки ґратки складних кристалів кубічної сингонії із врахуванням наслідків надпросторової симетрії, що дозволяє розглядати загальний генезис ускладнення фононних спектрів складних кристалів з $(2a \times 2a \times 2a)$ -надґраткою. Одержано узагальнену динамічну матрицю складного кристалу, яка містить у своєму складі матрицю дефекту мас, що дозволяє локалізувати реальні масові характеристики у певних точках відповідного базису протокристалу. Використовуючи модель аксіально-симетричних силових постійних, проаналізовано структуру динамічної матриці кристалів типу NaCl в надпросторовому підході. Власні значення динамічної матриці кристалу визначено у вигляді комбінації власних значень протокристалу, а дисперсійні криві протокристалу сформовано виходячи із значень силових постійних універсального силового поля α_i із врахуванням впливу макроскопічного електромагнітного поля. Для структури кристалу AuCu₃ досліджено тензорний характер модуляції силових постійних, отримано узагальнену динамічну матрицю з врахуванням масової та силової характеристик. Наведено фононний спектр кристалу у еквідистантному й нееквідистантному наближеннях.

У третьому розділі наведено результати розрахунку фононного спектру кристалів типу BaTiO₃ у еквідистантному та нееквідистантному наближеннях, розглянуто трансформацію фононного спектру при переході до кристалів з вакансіями, наведено класифікацію коливних мод у високосиметричних точках і напрямках зони Бриллюена, визначено умови сумісності, виходячи з наслідків концепції надпросторової симетрії. Отримано значення силових постійних міжатомної взаємодії кристалу BaTiO₃ при яких досягнуто найкращого співпадіння розрахунку з експериментальними даними і розрахунками інших авторів.

Четвертий розділ присвячений розгляду пакетів природних $(2a \times 2a \times 4c)$ – надґраток і $(3+d)$ -мірного опису в концепції надпросторової симетрії, який проведено, виходячи з простої кубічної ґратки протокристалу. Досліджено характер модуляції силових постійних у моделях еквідистантної та нееквідистантної міжатомної парної взаємодії для ланцюгу кристалів з $(2a \times 2a \times 4c)$ – надґраткою. Наведено розрахований фононних спектр для різних типів пакетів в різних моделях.

У п'ятому розділі описано перовськітні оксидні системи твердих розчинів в концепції надпросторової симетрії як $(4a \times 4a \times 4a)$ –надґратки. Наведено розрахований фононних спектр для різних типів твердих розчинів у наближенні еквідистантного силового поля, визначено значення силових постійних міжатомної взаємодії.

Слід відзначити ступінь обґрунтованості наукових положень і висновків. Таким чином, автором:

– створено універсальну методику аналізу й розрахунку дисперсії одночастинкових елементарних збуджень для досліджень генезису структурного ускладнення і трансформації фононних спектрів складних кристалів та систем із врахуванням модуляції силових постійних та проведено її оптимізацію, розроблено на її основі

програмне забезпечення, за допомогою якого проведено розрахунок законів дисперсії фононних спектрів конкретних кристалів і систем сімейства перовськіту, досліджено особливості фононного спектру при появі вакансій у певних позиціях кристалічної ґратки, вивчено генезис фононного спектру для ланцюгів кристалів з $(2a \times 2a \times 2a)$ - та $(2a \times 2a \times 4c)$ -надґраткою, а також перовськітних оксидних систем твердих розчинів заміщення як $(4a \times 4a \times 4a)$ -надґраток.

– на базі одноатомної простої кубічної ґратки протокристалу з врахуванням тензорної модуляції силових постійних отримано узагальнені динамічні матриці складних кристалів типу BaTiO_3 з $(2a \times 2a \times 2a)$ -надґраткою та типу $\text{BaSrTi}_2\text{O}_6$ з $(2a \times 2a \times 4c)$ - надґраткою.

– вперше показано можливість застосовності концепції надпросторової симетрії до узагальненого опису структур твердих розчинів. На базі одноатомної гранецентрованої кубічної ґратки протокристалу отримано узагальнені динамічні матриці систем сімейства перовськіту.

– динаміку ґратки складних кристалічних утворень представлено в суперпозиційній моделі з урахуванням вимог концепції надпросторової симетрії з використанням аксіально-симетричних силових постійних міжатомної взаємодії. Для врахування модуляції силових постійних при побудові узагальненої динамічної матриці реального фізичного об'єкта застосовано наближення нееквідистантного силового поля.

– вперше в концепції надпросторової симетрії розраховано фононні спектри кристалів з вакансіями, проаналізовано вплив вакансій на трансформацію фононних спектрів кристалів структурного типу перовськіту.

У дисертації представлено й інші результати, але вищезгаданих достатньо, на нашу думку, щоб відзначити високий науковий рівень дисертаційної роботи І.М.Шкирти, певні аспекти якої, безумовно, мають також і практичне значення. Так, зокрема, отримані надпросторові особливості кристалічної структури можуть бути успішно використані при розв'язанні багатьох різних проблем фізики твердого тіла, наприклад, для аналізу динаміки ґратки складних кристалів, структурних фазових переходів, при синтезі нових матеріалів з наперед заданими властивостями тощо.

Водночас слід зазначити, що дисертаційна робота І.М. Шкирти не позбавлена й окремих недоліків, серед яких варто виділити такі:

1. В роботі вказано на можливість використання еквідистантного і нееквідистантного наближень в динаміці ґратки, однак не чітко проілюстровано зв'язок між ними.

2. У розрахованому фононному спектрі всіх типів твердих розчинів сімейства перовськіту, які представлено на рис. 5.9– 5.14 і у таблиці 5.3, отримано, як висловлюється автор "нефізичне п'ятикратне виродження фононних частот". Цей факт, на нашу думку, потребує більш детального аналізу та пояснення.

3. На стор. 150 вказано, що шляхом підгонки розрахункових значень частот фононів у точці Γ до експериментальних значень та розрахунків інших авторів визначено значення силових постійних твердих розчинів перовськіту в концепції надпросторової симетрії, які наведено в таблиці 5.4. Однак не вказано посилання, які використано при такій процедурі. Крім того, у таблиці потрібно було навести відповідні експериментальні та розрахункові дані інших авторів і зробити відповідний аналіз.

Приведені зауваження, однак, не знижують наукової цінності отриманих дисертантом результатів і не ставлять під сумнів достовірність і новизну зроблених ним висновків.

Результати, отримані автором, достовірні, пройшли широку апробацію у вигляді виступів на наукових конференціях різного рівня. За матеріалами дисертації опубліковано 15 статей в наукових журналах із списку рецензованих наукових видань ВАК України та зареєстрованих у міжнародних наукових базах даних. Публікації й автореферат повністю відображають зміст дисертаційної роботи.

Таким чином, актуальність теми дисертації, вибір об'єктів та методів досліджень, відзначена наукова новизна отриманих результатів засвідчують загальний високий науковий рівень дисертаційного дослідження. В цілому дисертація є завершеним науковим дослідженням, результати якого суттєво доповнюють і розвивають фундаментальні знання про складні системи сімейства перовськіту.

На нашу думку, представлена робота "Дослідження дисперсійних залежностей фонованого спектру складних кубічних кристалів в концепції надпросторової симетрії" в повній мірі задовільняє п.п. 9, 10, 12 "Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника", затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України, а її автор, Шкирта Ігор Миколайович заслуговує присвоєння йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.10 – фізика напівпровідників і діелектриків.

Офіційний опонент,
доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник,
завідувач відділу матеріалів
функціональної електроніки
Інституту електронної фізики НАН України



Гомоннай О.В.

Підпис Гомонная Олександра Васильовича засвідчую:

Вчений секретар
Інституту електронної фізики НАН України
кандидат хімічних наук



Романова Л.Г.