Рішення
разової спеціалізованої вченої ради
про присудження ступеня доктора філософії

Здобувач ступеня доктора філософії **Тарас МАКАР,** 1997 року народження, громадянин України, освіта вища: закінчив у 2020 році факультет електроніки та комп'ютерних технологій Львівського національного університету імені Івана Франка за спеціальністю «Мікро- та наносистемна техніка», аспірант кафедри сенсорної та напівпровідникової електроніки Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України, м. Львів, виконав акредитовану освітньо-наукову програму «Прикладна фізика та наноматеріали».

Разова спеціалізована вчена рада, утворена наказом в.о. ректора Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України, м. Львів, від 03 червня 2025 року № 832, у складі:

Голови разової спеціалізованої вченої ради –	**Степана МУДРОГО**, доктора фізико-математичних наук, професора, завідувача кафедри фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України, м. Львів.
Рецензентів –	**Івана КАРБОВНИКА**, доктора фізико-математичних наук, доцента, завідувача кафедри радіофізики та комп'ютерних технологій Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України, м. Львів;
	Ігоря ОЛЕНИЧА, доктора фізико-математичних наук, професора, завідувача кафедри радіоелектронних і комп'ютерних систем Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України, м. Львів;
Офіційних опонентів –	**Володимира КОЦЮБИНСЬКОГО**, доктора фізико-математичних наук, професора, завідувача кафедри прикладної фізики і матеріалознавства Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника Міністерства освіти і науки України, м. Івано-Франківськ;
	Олександра СЕМЧУКА, доктора фізико-математичних наук, старшого наукового

співробітника, завідувача відділу фізики та хімії наносистем Інституту хімії поверхні імені О.О. Чуйка НАН України, м. Київ;

на засіданні «24» липня 2025 року прийняла рішення про присудження ступеня доктора філософії з галузі знань Природничі науки **Тарасу Макару** на підставі публічного захисту дисертації **«Електронні та структурні властивості поверхонь кристалічних халькогенідів індію»** за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали.

Дисертацію виконано у Львівському національному університеті імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України, м. Львів.

Науковий керівник: **Павло ГАЛІЙ,** доктор фізико-математичних наук, професор, професор кафедри сенсорної та напівпровідникової електроніки Львівського національного університету імені Івана Франка МОН України.

Дисертацію подано у вигляді спеціально підготовленого рукопису, який за змістом, рівнем наукової новизни, теоретичним й практичним значенням результатів, кількістю наукових публікацій відповідає вимогам пункту 6 Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 року № 44 (зі змінами), та вимогам до оформлення дисертацій, затвердженим наказом Міністерства освіти і науки України від 12 січня 2017 року № 40 (зі змінами).

Дисертація Тараса Макара є завершеною науковою працею в межах поставлених завдань і має вагоме значення для розвитку фізики поверхні, наноструктурованих матеріалів та низьковимірних систем. Робота поєднує фундаментальні дослідження морфології та електронно-енергетичної структури шаруватих халькогенідних кристалів з практичними підходами до керованого формування наносистем. Отримані результати мають як наукову новизну, так і прикладне значення для наноелектроніки, сенсорики та матеріалознавства, а також доповнюють дослідження у галузі створення наногетероструктур на основі анізотропних напівпровідникових підкладок. Отримані результати мають істотне значення для галузі знань Природничі науки.

Наукова новизна дослідження полягає в тому, що під час виконання дисертаційної роботи вперше встановлено закономірності самоорганізованого формування індієвих наносистем (0D та 1D) на природно наноструктурованих поверхнях (001) InTe та (100) In_4Se_3. Поверхні сколювання InTe використано як природний шаблон для одержання 0D наносистем та впорядкованих 0D наноструктур, морфологія яких визначається симетрією поверхневої ґратки. Для In_4Se_3 запропоновано новий підхід до створення 1D наноструктур на основі

контрольованої модифікації стехіометрії поверхні сколювання методом асиметричного іонного розпилення, без необхідності попередньої обробки або додаткового напилення індію. Виявлено вплив вторинного твердотільного змочування на морфологію наносистем In^0/(001)InTe. За допомогою УФЕСКР та методів DFT досліджено електронно-енергетичну структуру поверхні In_4Se_3, визначено ефективні маси носіїв та встановлено вплив підготовки зразків і тривалої експозиції у надвисокому вакуумі на спектральні характеристики. Вперше з'ясовано кінетику росту індієвих наноструктур у процесах нанесення, термообробки та дозування індію, що дозволяє забезпечити відтворюваність і стабільність їх морфологічних характеристик. Установлено також зв'язок між параметрами шорсткості поверхонь і латеральною періодичністю сформованих структур, що поглиблює уявлення про керовану самоорганізацію на анізотропних напівпровідникових підкладках. Отримані результати мають виражену наукову новизну, підтверджену, зокрема, патентом на корисну модель, та розширюють можливості реалізації функціональних елементів наноелектроніки.

Практична цінність результатів роботи Макара Тараса Романовича полягає у формуванні стабільних індієвих наносистем на поверхнях шаруватих халькогенідних кристалів In_4Se_3 та InTe, які виступають природними шаблонами для створення впорядкованих наногетероструктур. На відміну від класичних технологій формування наноструктур, запропоновано прості й технологічно привабливі методики, зокрема іонне модифікування поверхні, контрольоване вторинне твердотільне змочування та *in situ* обробка в умовах надвисокого вакууму. Ці методи забезпечують утворення 0D та 1D наноструктур з прогнозованими геометричними параметрами без потреби у складних етапах підготовки підкладки або нанесення додаткових матеріалів. Поверхня (001) InTe виявлена ефективною для формування металічних 0D наносистем, а поверхня (100) In_4Se_3 — для самоорганізації 1D структур. Отримані результати мають значний прикладний потенціал у проєктуванні елементів функціональної наноелектроніки — польових транзисторів, сенсорів, приладів на основі бар'єру Шотткі або елементів нанооптики.

Здобувач має 22 наукові публікації за темою дисертації, з них 5 (п'ять) наукових статей, опублікованих у виданнях, проіндексованих у наукометричних базах Scopus та/або Web of Science, зокрема, 2 (дві) статі опубліковані у наукових фахових виданнях України та 3 (три) – у закордонному періодичному виданні. Усі вказані статті опубліковано у виданнях, віднесених до третього – четвертого квартилів (Q3-Q4) відповідно до класифікації SCImago Journal and Country Rank або Journal Citation Reports, в тому числі одна стаття – у виданні, що належать до квартилю Q3 на момент опублікування:

1. Galiy, P. V., Nenchuk, T. M., Ciszewski, A., Mazur, P., Dzyuba, V. I., & **Makar, T. R.** (2021). InTe surface application as template for indium deposited nanosystem formation. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, *721*(1), 1–9. https://doi.org/10.1080/15421406.2021.1905270 (Scopus, Q4).

2. Galiy, P. V., Nenchuk, T. M., Ciszewski, A., Mazur, P., Tsvetkova, O. V., Dzyuba, V. I., & **Makar, T. R.** (2021). Solid-state Dewetting Formation of In/InTe Nanosystem. *J. Nano- Electron. Phys.*, *13*(4), 04032. https://doi.org/10.21272/jnep.13(4).04032 (Scopus, Q4).

3. Galiy, P. V., Nenchuk, T. M., Ciszewski, A., Mazur, P., Dzyuba, V. I., **Makar, T. R.**, & Tsvetkova, O. V. (2023). Indium deposited nanosystems formation on 2D layered chalcogenide crystals' surfaces. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, *768*(1), 20–32. https://doi.org/10.1080/15421406.2023.2231241 (Scopus, Q4).

4. **Makar, T. R.**, Dzyuba, V. I, Nenchuk, T. M., Tuziak, O. Ya., & Galiy, P. V. (2024). Electronic energy structure of the (100) In_4Se_3 surfaces at different preparation and treatment in ultraviolet photoelectron spectroscopy study. *Physics and Chemistry of Solid State*, *25*(1), 114–119. https://doi.org/10.15330/pcss.25.1.114-119 (Scopus, Q3).

5. Galiy, P. V., Nenchuk, T. M., Ciszewski, A., Mazur, P., Dzyuba, V. I., & **Makar, T. R.** (2024). Studies of indium nanostructures growth models on A^3B^6 layered templates. *Molecular Crystals and Liquid Crystals*, *768*(15), 799–808. https://doi.org/10.1080/15421406.2024.2361970 (Scopus, Q4).

У дискусії взяли участь голова і члени разової спеціалізованої вченої ради та висловили зауваження:

1. Степан МУДРИЙ, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри фізики металів Львівського національного університету імені Івана Франка МОН України, без зауважень.

2. Володимир КОЦЮБИНСЬКИЙ, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри прикладної фізики і матеріалознавства Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника МОН України, надав позитивний відгук із зауваженнями:

1. У розділі, присвяченому морфологічному аналізу поверхонь сколювання кристалів In_4Se_3 та InTe, варто було б детальніше обґрунтувати вибір конкретних параметрів сканування у СТМ/СТС-експериментах, зокрема площі зон сканування, режимів зонда та температурного контролю в умовах in situ. Зокрема, у підрозділі 4.1.1. (с. 91), де подано аналіз морфології поверхонь (001) InTe методом скануючої тунельної мікроскопії, автор обмежується якісним описом результатів та графічним представленням топографії поверхні,

однак не надає конкретних експериментальних параметрів: напруги тунелювання, сили струму. Для скількох поверхнях сколювання монокристалів InTe вирощених методом Бріджмена та монокристалів In_4S_3 вирощених методом Чохральського здійсювався СТМ/СТС аналіз?

2. На рис. 3.8.а (с. 79) наведено результати порошкової дифрактомерії для диспергованого монокристалу InTe, що дозволило верифікувати відсутність додаткових фаз та тип просторової групи симетрії. Водночас, для монокристалів InTe з орієнтацією (001) доцільним було б здійснення ω-сканування для рефлексу (004), що дозволило б отримати інформацію про мозаїчність зразків та ступінь їх структурної досконалості уздовж осі *c*.
3. Під час обговорення ефектів твердотільного змочування індієм при формуванні 0D та 1D наноструктур автором здійснено якісний опис процесів їх нуклеації та росту на поверхнях In_4Se_3 та InTe. Водночас, наведена інформація про вплив кінетичних факторів на формування наноструктур індію для обох типів підкладок (зокрема з позицій термодинаміки змочування, енергії активації поверхневої дифузії, характеру взаємодії металу з підкладкою, типу переважаючої моделі росту) потребує доповнення.
4. Для спектроскопічних досліджень, виконаних методами УФЕСКР та ХФЕС, у роботі наведено енергетичну роздільну здатність приладів (80 меВ для УФЕСКР та 0,3 еВ для ХФЕС), однак відсутня оцінка точності визначення параметрів електронної структури. Якою була похибка визначення енергетичних положень станів у валентній зони та положення максимумів густини станів? Яким чином здійснювалася обробка фонових складових спектрів?
5. Під час опису результатів DFT-моделювання електронної структури (розділ 3, підр. 3.1.2) потребує уточнення вибір типу використаного GGA-функціоналу обміну-кореляції у формі Пердью-Берка-Енцергофа та його переваги порівняно з функціоналами, що враховують ван-дер-Ваальсові міжшарові взаємодії.
6. Чи робилися кількісні оцінки параметрів йонного розпилення на періодичність борознистої поверхні In_4Se_3 та геометрію отриманих наноструктур?

3. Олександр СЕМЧУК, доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, завідувач відділу фізики та хімії наносистем Інституту хімії поверхні імені О.О. Чуйка НАН України, надав позитивний відгук із зауваженнями:

1. У дисертаційній роботі наведено електронні спектри *E(k)* для поверхні сколювання (100) In_4Se_3, однак не описано шлях їх експериментального одержання. Варто зауважити, що для побудови таких дисперсійних залежностей необхідно експериментально отримати серію УФЕС-спектрів (інтенсивність емісії залежно від кінетичної енергії електронів) при різних кутах емісії фотоелектронів. Лише за таких умов можливо коректно

реконструювати залежність енергії від квазіімпульсу $E(k_{//})$. Було б доцільно чітко зазначити, чи така методика вимірювань дійсно застосовувалась у роботі, а також яким програмним забезпеченням здійснювалась обробка та побудова дисперсійних спектрів. Крім того, для повноти аналізу електронної структури доцільно було б провести вимірювання у напрямку, перпендикулярному до поверхні, з урахуванням компоненти імпульсу $k_{\perp}$. Це дозволило б реконструювати тривимірну залежність енергії електрона від його квазіімпульсу, і більш повно охарактеризувати зонну структуру In_4Se_3.

2. У дисертації недостатньо детально описано процедуру отримання топографії поверхонь сколювання та густини електронних станів на поверхнях чистих кристалічних підкладок і кристалічних підкладок з осадженими атомами індію. Окрім того, доцільно уточнити параметри процесу напилення індію: метод осадження, густину потоку атомів, тривалість напилення та умови (температура, тиск), що дозволило б оцінити відтворюваність і контрольованість формування наносистем.
3. У дисертаційній роботі не вказано в повній мірі, які саме програмні пакети були використані для обробки та візуалізації результатів скануючої тунельної мікроскопії та спектроскопії (СТМ/СТС). З огляду на важливість коректної інтерпретації просторових та енергетичних характеристик наносистем, доцільно було б зазначити конкретне програмне забезпечення, що застосовувалося для побудови топографічних зображень, спектрів локальної густини станів, а також для їх фільтрації чи числової обробки. Це сприяло б підвищенню відтворюваності результатів і прозорості застосованих методик.
4. У розділі, присвяченому аналізу результатів порошкової дифрактометрії, відсутня інформація щодо джерела теоретичних референсних (еталонних) дифракційних даних, які використовувалися для ідентифікації фаз (наприклад, бази даних PDF-2 (ICDD), COD тощо). Також не вказано, за допомогою якого програмного забезпечення проводився аналіз експериментальних дифрактограм та порівняння з теоретичними даними. Наявність цієї інформації є необхідною для забезпечення прозорості та відтворюваності аналізу фазового складу досліджуваних зразків.
5. У дисертаційній роботі в окремих місцях трапляються описки, граматичні та стилістичні неточності, які не впливають на загальну наукову цінність роботи, проте потребують уважнішого редагування для забезпечення мовної та стилістичної цілісності тексту.

4. Іван КАРБОВНИК, доктор фізико-математичних наук, доцент, завідувач кафедри радіофізики та комп'ютерних технологій Львівського національного університету імені Івана Франка МОН України, надав позитивну рецензію із зауваженнями:

1. У розділі 5.1 описано два "потоки" експериментальних умов. Обидва підходи включають термічну обробку, проте наявне формулювання залишає простір для неоднозначного трактування. Тут варто було б чіткіше окреслити, який фактор є ключовим для кожного з підходів: накопичення індію, тривалість осадження, кількість циклів, чи температура, аби прояснити різницю цих методів.
2. У пункті роботи 4.1.1 вжито вислів "активаційно-міграційний рух", який швидше не має загальновживаного значення у матеріалознавстві. Доцільно було б говорити радше про "поверхневу дифузію, активовану термічним відпалом" чи "термічно активовану міграцію атомів", що краще відображає механізм переміщення індію по поверхні під впливом тепла.
3. У розділах 4 та 5 представлено обробку СТМ-зображень із розрахунком статистичних параметрів шорсткості поверхні, зокрема середньоквадратичної шорсткості (RMS), асиметрії (Skewness) та ексцесу (Kurtosis). Однак у тексті недостатньо пояснено фізичний зміст цих параметрів і те, яку інформацію про морфологію поверхні вони надають. Також, такий параметр як, наприклад, середньоквадратична шорсткість вимагає узгодженості одиниць та методики розрахунку, якщо він використовується для порівнянь з літературними даними.

5. Ігор ОЛЕНИЧ, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри радіоелектронних і комп'ютерних систем Львівського національного університету імені Івана Франка МОН України, надав позитивну рецензію із зауваженнями:

1. У роботі не зазначено, який метод фонової корекції було застосовано під час обробки Х-променевих фотоелектронних спектрів. Це є суттєвим моментом, оскільки вибір фону (наприклад, Shirley, Tougaard чи інший) безпосередньо впливає на точність визначення площі піків і, відповідно, на кількісний аналіз. Крім того, відсутня інформація щодо еталонного елемента, за яким проводилося калібрування енергетичної шкали (наприклад, положення піку C 1s = 284.8 еВ для забруднень вуглецю). Це ускладнює оцінку достовірності визначених енергетичних положень піків та інтерпретації хімічних станів елементів.
2. Оскільки об'єктом досліджень є поверхні кристалів, то розрахунки електронної структури доцільно було би провести для напівнескінченної або slab-структури для виділення поверхневих станів. Крім того, у роботі не наведено застосованого методу розв'язування рівняння Кона-Шема в рамках теорії функціонала густини, вибір якого обумовлюється специфікою досліджуваних сполук.
3. Під час аналізу механізму самоорганізованого формування 0D наноструктур доцільно враховувати також енергетичні характеристики, зокрема

співвідношення поверхневої енергії та енергії межі розділу, які поряд з узгодженістю параметрів ґраток і кінетичними ефектами, що залежать від температури підкладки та швидкості осадження матеріалу, істотно впливають на механізми формування поверхневих структур, особливо у разі тривалого осадження, коли можуть утворюватися суцільні шари матеріалу. Крім того, у роботі не вказано, що слугує центрами активації росту наноструктур і чи контролювалася температура підкладки у процесі осадження, а також не зазначена тривалість послідовних відпалів.

4. Зміну стехіометрії поверхні шаруватих кристалів In_4Se_3 та InTe внаслідок іонного розпилення здобувач обґрунтовано пов'язує з нерівномірним розпиленням компонентів внаслідок різних значень коефіцієнта розпилення In, Se та Te. Проте, варто детальніше дослідити кількісні характеристики зміни стехіометрії зазначених шаруватих кристалів з врахуванням атомних мас компонентів сполук і тривалості розпилення.

Результати відкритого голосування:

«За» – 5 (п'ять) членів ради,

«Проти» – немає членів ради.

На підставі результатів відкритого голосування разова спеціалізована вчена рада ДФ 35.051.261 Львівського національного університету імені Івана Франка Міністерства освіти і науки України, м. Львів, присуджує **Тарасу МАКАРУ** ступінь доктора філософії з галузі знань Природничі науки за спеціальністю 105 Прикладна фізика та наноматеріали.

Відеозапис трансляції захисту дисертації додається.

Голова спеціалізованої вченої ради
ДФ 35.051.261 _____ **Степан МУДРИЙ**

Підпис Степана Мудрого
ПІДТВЕРДЖУЮ
ВЧЕНИЙ СЕКРЕТАР
ЛЬВІВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО
УНІВЕРСИТЕТУ ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА

Проректор з науково роботи Олена Ква