

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Манякина Максима Дмитриевича «**Электронное строение объемных и наноструктурированных материалов системы олово – кислород по данным первопринципного компьютерного моделирования**», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – «физика полупроводников».

Особое внимание в физике полупроводников уделяется синтезу новых функциональных материалов и изучению их свойств. Одними из наиболее перспективных полупроводниковых материалов являются наноструктуры на основе оксидов олова. Удачное сочетание электронных и оптических характеристик оксидов олова обуславливает их широкое применение в самых разнообразных промышленных областях. В частности, диоксид олова используется при производстве датчиков газа, прозрачных проводящих покрытий и электродов, фотовольтаических приборов, светоизлучающих диодов, плоских дисплеев. Моноксид олова может применяться при производстве прозрачных тонкопленочных транзисторов и литий-ионных батарей.

Принципиально важной задачей при исследовании новых материалов является тщательное изучение особенностей их электронного строения, поскольку именно электронная структура определяет электрофизические, оптические и многие другие свойства материала. Высокоэффективным подходом к решению данной проблемы является использование методов первопринципного компьютерного моделирования. Результаты компьютерных вычислений не только дают прямую информацию об электронном строении, но и являются инструментом, позволяющим анализировать экспериментальные данные. Это особенно важно в тех случаях, когда в силу физических ограничений применяемых экспериментальных методов получаемые результаты содержат противоречия и не позволяют однозначно объяснить наблюдаемые особенности электронной структуры материала.

В связи с вышесказанным, диссертационная работа Манякина М.Д. «**Электронное строение объемных и наноструктурированных материалов системы олово – кислород по данным первопринципного компьютерного моделирования**», ориентированная на детальное исследование взаимосвязи между пространственной и электронной структурой различных соединений системы олово – кислород, вне всякого сомнения является **актуальной**.

Диссертация соответствует паспорту специальности 01.04.10 – «Физика полупроводников» в части пункта 5 «Электронные спектры полупроводниковых материалов и композиционных соединений на их основе», пункта 17 «Моделирование свойств и физических явлений в полупроводниках и структурах, технологических процессов и полупроводниковых приборов».

Диссертация состоит из введения, четырех глав, выводов из работы и списка цитируемой литературы. Содержание работы изложено на 174 страницах машинописного текста, включая 76 рисунков, 10 таблиц и списка литературы из 174 наименований.

Среди наиболее важных научных **результатов** следует выделить следующие:

1. Для исследуемых в работе соединений рассчитаны спектры рентгеновского поглощения вблизи Sn L_3 , Sn $M_{4,5}$ и O K краев, позволяющие оценить распределение плотности незанятых электронных состояний.

2. Предложена методика, позволяющая на основе метода линейной комбинации теоретически рассчитанных спектров XANES Sn $M_{4,5}$ эталонных фаз, оценивать фазовый состав поверхностных слоев реальных образцов системы олово – кислород.

3. На основе расчета нанопленок β -Sn и SnO₂ (T) (001) с вариацией толщины в широком диапазоне предложены модели, описывающие послойную трансформацию электронного строения вблизи поверхности объемных кристаллов металлического олова и диоксида олова.

4. При расчете спектров XANES нанопленок проведено компьютерное моделирование с комбинированием методов слоистой сверхрешетки и остовой дырки. Показано, что для атомов в поверхностном слое нанопленок β -Sn и SnO₂ (T) влияние, оказываемое поверхностью, значительно больше влияния, оказываемого остовой дыркой.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном проведении расчетов электронной структуры объемных и нанопленочных соединений системы Sn–O, анализе и обработке полученных результатов.

Научная и практическая ценность работы состоит в том, что впервые в едином комплексном подходе проведены расчеты электронной структуры олова и его известных стабильных оксидных фаз. В частности, с применением приближения «остовой дырки» рассчитаны спектры рентгеновского поглощения вблизи Sn L_3 , Sn $M_{4,5}$ и O K краев, характеризующие строение зоны проводимости исследованных соединений. Полученные результаты расширяют представления об особенностях электронного строения оксидов олова, демонстрируют связь их атомной

кристаллической структуры, стехиометрии, пространственной размерности и энергетической структуры. Таким образом, полученные результаты могут быть использованы при исследовании, в том числе экспериментальным путем, различных как по составу, так и по размерности и морфологии материалов системы Sn–O.

Достоверность результатов и выводов диссертации обеспечивается использованием современных многократно апробированных методов расчета электронной структуры, внутренней непротиворечивостью полученных результатов, высокой степенью согласия между данными моделирования и экспериментов.

Вместе с тем, работа не лишена некоторых недостатков, по которым можно сделать следующие **замечания**:

1. При проведении анализа экспериментальных спектров XANES Sn $M_{4,5}$ методом линейной комбинации, вклады эталонных спектров менялись с шагом 5%. Почему было выбрано именно такое значение, а не 1%?

2. При расчетах XANES Sn $M_{4,5}$ спектров не учитывалось спин-орбитальное расщепление основного 3d уровня. Могло ли это повлиять на конечный результат расчета и результаты анализа методом линейной комбинации?

3. Из диссертации не ясно почему применение потенциала mBJ в случае SnO₂ (T) привело к результату отлично согласующемуся с экспериментом, а в случае SnO – не привело.

4. В Главе 4 приводятся результаты расчетов электронной структуры нанопленок металлического олова и тетрагональной фазы диоксида олова. Почему не было проведено моделирование пленок для монооксида олова и орторомбической фазы диоксида олова?

Сделанные замечания не снижают общего положительного впечатления о работе.

Рассматривая диссертационную работу Манякина М.Д. в целом, следует отметить, что она является законченной научно-исследовательской работой, обладающей новизной и актуальностью. Материал изложен обоснованно, в логичном порядке. Автореферат в полной мере отражает содержание диссертации. Работа прошла хорошую апробацию на научных конференциях различного уровня. Основные результаты представлены в 11 публикациях, в том числе шести статьях в рецензируемых научных журналах, индексируемых системами Web of Science, Scopus, РИНЦ и входящих в перечень ВАК.

Таким образом, считаю, что диссертация «Электронное строение объемных и наноструктурированных материалов системы олово – кислород

по данным первопринципного компьютерного моделирования» выполнена на высоком научном уровне и по своей актуальности, новизне, достоверности и совокупности полученных результатов соответствует всем критериям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Манякин Максим Дмитриевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 - Физика полупроводников.

«25» декабря 2020 г.



Официальный оппонент,
Лаврентьев Анатолий Александрович,
доктор физико-математических наук
(специальность 01.04.07 – физика
конденсированного состояния), профессор
ФГБОУ ВО «Донской государственный
технический университет», факультет
«Автоматизация, мехатроника и
управление», кафедра «Электротехника и
электроника»

ФГБОУ ВО «Донской государственный технический университет»,
кафедра «Электротехника и электроника» факультет «Автоматизация,
мехатроника и управление» ДГТУ, 344000, г. Ростов-на-Дону, пл. Гагарина, 1
р.т. + 7 (863) 273-85-47
м.т. +7 (928) 601-45-39
E-mail: alavrentyev@donstu.ru

Подпись Лаврентьева А. А. удостоверена
Ученый секретарь Ученого Совета ДГТУ



Анисимов В. Н.