

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы
Манякина Максима Дмитриевича
на тему «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».

Развитие теоретических методов и совершенствование электронно-вычислительной техники позволяют с недоступной ранее точностью и надежностью проводить моделирование электронной структуры твердых тел. Представленная диссертационная работа Манякина М.Д. посвящена расчетам энергетической зонной структуры и рентгеноспектральных характеристик объемных и тонкопленочных материалов системы олово-кислород. Полупроводниковые материалы на основе соединений олова и кислорода являются крайне востребованными во многих областях современной науки и техники. Разработке новых материалов на основе оксидов олова посвящены сотни статей, ежегодно публикуемых в ведущих научных периодических изданиях. По этой причине диссертационная работа, целью которой является «установление закономерностей электронного строения оксидов олова на основе расчетов из первых принципов и определение взаимосвязи между электронной структурой и пространственной атомной структурой реальных образцов материалов системы олово – кислород» представляется актуальной.

Диссертантом в работе для проведения расчетов электронной структуры применяется метод Линеаризованных присоединенных плоских волн Теории функционала плотности, реализованных в программном пакете Wien2k. Этот метод относится к так называемым первопринципным (ab initio) методам расчета, позволяющим без привлечения эмпирических данных получать основные характеристики зонной структуры твердых тел. Результаты вычислений проведенных в работе хорошо согласуются с экспериментальными данными, полученными методами рентгеновской эмиссионной, абсорбционной и фотоэлектронной спектроскопии.

Ряд полученных автором результатов являются новыми и вызывают научный интерес. К наиболее важным результатам можно отнести следующие:

- Разработана и продемонстрирована методика оценки фазового состава тонких (~10 нм) поверхностных слоев материалов системы Sn-O путем

проведения анализа их экспериментальных спектров рентгеновского поглощения Sn $M_{4,5}$ методом линейной комбинации. Существенно, что в качестве базисного набора спектров при проведении линейной комбинации выступают спектры эталонных соединений, полученные путем моделирования.

- Обнаружено формирование значительного количества орторомбической фазы диоксида олова в нанослоях, полученных путем магнетронного напыления и последующего термического отжига на атмосфере. Важно отметить, что эта фаза обычно образуется при приложении высоких внешних давлений.

- на основе расчетов нанопленок олова и диоксида олова в широком диапазоне толщин предложены модельные объекты, описывающие трансформацию электронной структуры вблизи поверхности объемных кристаллов β -Sn и SnO₂ (T).

- проведены сложные вычисления спектров рентгеновского поглощения для атомов, лежащих в поверхностных слоях нанопленок, для чего одновременно использовались приближения «остовой дырки» и «слоистой сверхрешетки». Обнаружено, что влияние поверхности на результаты расчетов существенно выше влияния «остовой дырки», которым в первом приближении можно пренебречь.

- Стоит также отметить, что результаты расчетов электронной структуры и рентгеновских спектров для объемного кристалла орторомбической модификации диоксида олова и нанопленок металлического олова получены автором впервые.

Практическая значимость полученных результатов не вызывает сомнения. Результаты диссертации могут найти применение при диагностике физико-химического состояния поверхности разнообразных материалов на основе оксидов олова.

Достоверность результатов диссертации опирается на надежность используемых в работе методов и подходов к моделированию электронной структуры, продемонстрированное согласие результатов вычислений со всем имеющимся массивом экспериментальных данных, их внутренней непротиворечивостью.

В качестве замечания к представленному автореферату следует указать следующее:

- на стр. 14 обсуждаются особенности электронной структуры нанопленок диоксида олова, однако иллюстрации, демонстрирующие результаты расчетов, отсутствуют. Это затрудняет восприятие материала.

Тем не менее, данное замечание не принижает уровень проделанной работы.

Диссертационная работа «Электронное строение объемных и наноструктурированных материалов системы олово – кислород по данным первопринципного компьютерного моделирования», по совокупности квалификационных критериев: актуальности, научной новизне, достоверности полученных результатов, практической значимости, количестве публикаций по теме диссертации, соответствует требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор Манякин Максим Дмитриевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – «Физика полупроводников».

Батаронов Игорь Леонидович, доктор физико-математических наук (научная специальность – 01.04.07 «Физика конденсированного состояния»), профессор, заведующий кафедрой высшей математики и физико-математического моделирования ФГБОУ ВО "Воронежский государственный технический университет"

тел. 246-42-22, e-mail: vmfmm@mail.ru

394006, г. Воронеж, ул. 20-летия Октября, 84

«28» декабря 2020 г.



Я, Батаронов Игорь Леонидович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета Д 212.038.10, и их дальнейшую обработку.

«28» декабря 2020 г.



Подпись И. Л. Батаронова

Заведующий кафедрой
И. О. Батаронов
И. О. Бусев
28.12.2020

