

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **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».

Разработка новых материалов и наноструктур – одна из наиболее актуальных и активно развивающихся областей современной физики твердого тела. Оксиды олова обладают интересными оптическими и электронными характеристиками, благодаря чему они часто становятся основой для создания новых наноматериалов. Физические свойства наноматериалов во многом отличаются от свойств объемных материалов, что связано с особенностями их пространственного и электронного строения. С целью повышения достоверности и надежности результатов, изучение свойств наноматериалов необходимо проводить как экспериментальным так теоретическим путем. Поэтому *актуальность* диссертационной работы Манякина М.Д., посвященной изучению взаимосвязи между пространственной атомной структурой и электронным строением различных соединений системы Sn-O *не вызывает сомнений*.

Используя современные методы компьютерного моделирования, автор получает большой объем новых научных данных характеризующих электронное строение эталонных кристаллических соединений: металлического олова и его стехиометрических оксидов. На основе расчетов парциальных плотностей состояний наглядно объясняется разница между экспериментальными фотоэлектронными спектрами, зарегистрированными при существенно различных энергиях рентгеновского излучения. Показана эффективная возможность применения метода линейной комбинации (LCF) теоретически рассчитанных спектров рентгеновского поглощения олова в эталонных соединениях для анализа электронной структуры и фазового состава различных реальных образцов, в т.ч. тонких нанослоев. Для случая металлического олова и тетрагональной фазы диоксида олова проведена серия расчетов нанопленок. Детально исследованы изменения электронного строения нанопленки при изменении ее толщины. Изучено влияние, оказываемое поверхностью пленки на свойства слоев, лежащих в ее глубине. Обосновано применение пленок толщиной в 10 элементарных ячеек для олова и 8 ячеек для диоксида олова в качестве модельных объектов, описывающих электронную структуру соответствующих объемных кристаллов вблизи их поверхностей.

Замечания:

- первое положение, представленное к защите, сформулировано не достаточно конкретно;
- не определены численные значения коэффициентов корреляций экспериментальных и теоретических спектров, выполнены только сопоставления графиков.

