

## ПРОТОКОЛ № 2

заседания диссертационного совета Д 212.038.10

от 28 января 2021 г.

**ЧЛЕНОВ СОВЕТА ВСЕГО:** 22

**ПРИСУТСТВОВАЛИ:** согласно явочному листу 15 членов совета (из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации):

Терехов Владимир Андреевич	д.ф.–м.н.	01.04.10
Бобрешов Анатолий Михайлович	д.ф.–м.н.	01.04.03
Домашевская Эвелина Павловна	д.ф.–м.н.	01.04.10
Степкин Владислав Андреевич	к.ф.–м.н.	01.04.03
Корчагин Юрий Эдуардович	д.ф.–м.н.	01.04.03
Переселков Сергей Алексеевич	д.ф.–м.н.	01.04.03
Усков Григорий Константинович	д.ф.–м.н.	01.04.03
Бормонтов Евгений Николаевич	д.ф.–м.н.	01.04.10
Овчинников Олег Владимирович	д.ф.–м.н.	01.04.10
Середин Павел Владимирович	д.ф.–м.н.	01.04.10
Турищев Сергей Юрьевич	д.ф.–м.н.	01.04.10
Абрамов Геннадий Владимирович	д.т.н.	05.13.01
Задорожний Владимир Григорьевич	д.ф.–м.н.	05.13.01
Курбатов Виталий Геннадьевич	д.ф.–м.н.	05.13.01
Каширина Ирина Леонидовна	д.т.н.	05.13.01

### ПОВЕСТКА ДНЯ:

Защита диссертации Манякина Максима Дмитриевича на тему «Электронное строение объемных и наноструктурированных материалов системы олово – кислород по данным первопринципного компьютерного моделирования», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

**Диссертация выполнена** на кафедре физики твердого тела и наноструктур физического факультета федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Воронежский государственный университет», Минобрнауки России.

**Научный руководитель** – доктор физико-математических наук, профессор, Курганский Сергей Иванович, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», физический факультет, кафедра физики твердого тела и наноструктур, профессор.

### Официальные оппоненты:

Лаврентьев Анатолий Александрович, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Донской государственный технический университет», кафедра «Электротехника и электроника», заведующий кафедрой;

Котов Геннадий Иванович, доктор физико-математических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего

образования "Воронежский государственный университет инженерных технологий", кафедра физики, теплотехники и теплоэнергетики, профессор.

**Ведущая организация** - федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук» (г. Ижевск).

**СЛУШАЛИ:** Защиту диссертации Манякина Максима Дмитриевича на тему «Электронное строение объемных и наноструктурированных материалов системы олово – кислород по данным первопринципного компьютерного моделирования», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

*Вопросы по защищаемой диссертации задали:* д.ф.-м.н., проф. Терехов В.А., д.ф.-м.н. Турищев С.Ю., д.ф.-м.н., проф. Бобрешов А.М., д.т.н. Каширина И.Л., д.ф.-м.н., проф. Курбатов В.Г.

*В дискуссии приняли участие:* д.ф.-м.н., проф. Терехов В.А., д.ф.-м.н. Турищев С.Ю.

**ПОСТАНОВИЛИ:**

1. На основании результатов тайного голосования присудить Манякину Максиму Дмитриевичу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

Результаты голосования: за – 15, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

2. Принять заключение диссертационного совета по диссертации Манякина Максима Дмитриевича на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

*(Стенограмма заседания, протокол счетной комиссии и заключение диссертационного совета прилагаются)*

Председатель

диссертационного совета

Ученый секретарь

диссертационного совета



Терехов В.А.

Степкин В.А.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.038.10,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ «ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
УНИВЕРСИТЕТ», МИНОБРНАУКИ РОССИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА  
СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

Аттестационное дело № \_\_\_\_\_,  
решение диссертационного совета от 28 января 2021 года № 2

О присуждении Манякину Максиму Дмитриевичу, гражданину Российской Федерации, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Электронное строение объемных и наноструктурированных материалов системы олово – кислород по данным первопринципного компьютерного моделирования» по специальности 01.04.10 – «Физика полупроводников» (физико-математические науки) принята к защите 29 октября 2020 г. (протокол заседания №6) диссертационным советом Д 212.038.10, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Воронежский государственный университет», Минобрнауки России, 394018, г. Воронеж, Университетская пл., д.1, приказ Минобрнауки России №1121/нк от 16.11.2017.

Соискатель Манякин Максим Дмитриевич, 1990 года рождения, работает младшим научным сотрудником совместной лаборатории «Электронное строение твердого тела» ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет» и ФГБУН «Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова Российской академии наук», Минобрнауки России.

В 2011 г. окончил бакалавриат государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Воронежский государственный университет» по направлению «Физика». В 2013 г. окончил магистратуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Воронежский государственный университет» по направлению подготовки 011200 Физика. В 2017 г. окончил очную аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования

«Воронежский государственный университет».

Диссертация выполнена на кафедре физики твердого тела и наноструктур физического факультета ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», Минобрнауки России.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор, Курганский Сергей Иванович, ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», физический факультет, кафедра физики твердого тела и наноструктур, профессор.

Официальные оппоненты:

Лаврентьев Анатолий Александрович, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Донской государственный технический университет», кафедра «Электротехника и электроника», заведующий кафедрой;

Котов Геннадий Иванович, доктор физико-математических наук, доцент, Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Воронежский государственный университет инженерных технологий", кафедра физики, теплотехники и теплоэнергетики, профессор;

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения Российской академии наук» (г. Ижевск) в своём положительном отзыве, подписанным Добышевой Людмилой Викторовной, доктором физико-математических наук, ведущим научным сотрудником Физико-технического института, и Аржниковым Анатолием Константиновичем, доктором физико-математических наук, главным научным сотрудником Физико-технического института, указала, что диссертация является завершённой научно-квалификационной работой, в которой содержится решение актуальных задач, имеющих значение для физики полупроводников, важных для отработки вопросов анализа атомной и электронной структуры и свойств полупроводников на основе оксидов олова.

По объему, научной новизне, практической значимости и достоверности диссертация удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе критериям, установленным в разделе II «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, Манякин Максим Дмитриевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 – физика полупроводников.

Соискатель имеет 59 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 11 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 6 работ, из которых 4 – в издании, индексируемом в международной базе Scopus. Все опубликованные работы посвящены изучению особенностей электронного строения объемных и наноструктурированных материалов системы олово – кислород. Авторский вклад составляет 85%. Общий объем научных изданий составляет 8,9 печатных листа.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации:

1. Теоретическое и экспериментальное исследование электронной структуры диоксида олова / С.И. Курганский, М.Д. Манякин, О.И. Дубровский, О.А. Чувенкова, С.Ю. Турищев, Э.П. Домашевская // Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56, № 6. – С. 1690 – 1695.

2. A novel approach to the electronic structure and surface composition investigations of tin-oxygen system materials by means of X-ray absorption spectroscopy combined with ab initio calculations / M.D. Manyakin, S.I. Kurganskii, O.I. Dubrovskii, O.A. Chuvenkova, E.P. Domashevskaya, S.V. Ryabtsev, R. Ovsyannikov, S.Yu. Turishchev // Computational Materials Science. – 2016. – V. 121. – P. 119 – 123.

3. Electronic and atomic structure studies of tin oxide layers using X-ray absorption near edge structure spectroscopy data modelling / M.D. Manyakin, S.I. Kurganskii, O.I. Dubrovskii, O.A. Chuvenkova, E.P. Domashevskaya, S.V. Ryabtsev, R. Ovsyannikov, E.V. Parinova, V. Sivakov, S.Yu. Turishchev // Materials Science in Semiconductor Processing. – 2019. – V. 99, N 1. – P. 28 – 33.

На диссертацию и автореферат поступило 4 отзыва: 1) ФГБОУ ВО

«Вологодский государственный университет», профессор кафедры автоматики и вычислительной техники, д.ф.-м.н., профессор Горбунов В.А.; 2) ФГБОУ ВО "Воронежский государственный технический университет", заведующий кафедрой высшей математики и физико-математического моделирования, д.ф.-м.н., профессор Батаронов Игорь Леонидович; 3) ФГБУН Омский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук, главный научный сотрудник лаборатории физики наноматериалов и гетероструктур, д.ф.-м.н., профессор Болотов В.В. и научный сотрудник лаборатории физики наноматериалов и гетероструктур, к.ф.-м.н., Несов С.Н; 4) ФГБОУ ВО «Липецкий педагогический университет имени П.П. Семенова-Тян-Шанского», профессор кафедры «Математики и физики», заведующий лабораторией «Физики полупроводников и твердотельной электроники», д.ф.-м.н., доцент Филиппов Владимир Владимирович;

Все отзывы положительные. В них подчёркивается актуальность, научная и практическая значимость, новизна работы. Замечания носят частный, рекомендательный или уточняющий характер.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их известностью достижениями в данной отрасли науки, наличием публикаций по теме диссертации в рецензируемых научных изданиях и способностью определить научную и практическую ценность диссертации.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

**разработана** методика численной оценки фазового состава поверхностных слоев материалов системы олово – кислород по форме их экспериментального спектра Sn  $M_{4,5}$  путем линейной комбинации рассчитанных из первых принципов спектров эталонных соединений  $\beta$ -Sn, SnO, SnO<sub>2</sub> (T), SnO<sub>2</sub> (O);

**предложена** математическая модель трансформации электронного строения вблизи поверхности объемных кристаллов  $\beta$ -Sn и SnO<sub>2</sub> (T), основанная на послойном анализе плотностей состояний в нанопленках толщиной 33,6 Å для  $\beta$ -Sn и 26,1 Å для SnO<sub>2</sub> (T);

**доказано**, что наблюдающийся в экспериментальных спектрах XANES Sn  $M_{4,5}$  максимум при энергии 488 эВ связан с плотностью незанятых *p*-состояний

монооксида олова, содержащегося в поверхностных слоях образцов  $\text{SnO}_{2-x}$ ; **введён** способ расчёта спектров рентгеновского поглощения XANES для нанопленок, заключающийся в одновременном использовании приближений «остовой дырки» и «слоистой сверхрешетки».

**Теоретическая значимость исследования** обоснована тем, что:

**исследованы** особенности строения зоны проводимости олова и его полупроводниковых оксидов, рассчитаны характеризующие зону проводимости парциальные плотности состояний и спектры рентгеновского поглощения XANES вблизи Sn  $L_3$ , Sn  $M_{4,5}$  и O K краев для объёмных кристаллов  $\beta$ -Sn, SnO,  $\text{SnO}_2$  (T),  $\text{SnO}_2$  (O);

**показано**, что в нанопленках  $\text{SnO}_2$  (T) для атомов, лежащих вблизи поверхности, наблюдается возникновение энергетических состояний в запрещенной зоне;

**применительно к проблематике диссертации результативно использованы** современные методы компьютерного моделирования электронного строения кристаллических структур, в основе которых лежит теория функционала плотности: полнопотенциальный метод линеаризованных присоединенных плоских волн для расчёта электронной структуры кристаллических веществ, метод «остовой дырки» для расчётов спектров рентгеновского поглощения XANES, приближение «слоистой сверхрешетки» для моделирования пространственной структуры нанопленок;

**раскрыты** основные особенности электронной структуры для атомов, лежащих в различных слоях нанопленок  $\beta$ -Sn и  $\text{SnO}_2$  (T) при послойном анализе от центра пленки к ее поверхности;

**изучена** динамика фазовых превращений в тонких поверхностных слоях группы нанопленок, полученных путем магнетронного напыления олова на подложки кремния с их последующим высокотемпературным отжигом в атмосфере от  $170^\circ\text{C}$  до  $450^\circ\text{C}$ , заключающаяся в постепенном окислении нанопленок от многокомпонентной системы, содержащей олово, моно- и диоксид олова до двухкомпонентной, содержащей тетрагональную и орторомбическую фазы  $\text{SnO}_2$ .

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

**разработана** новая методика оценки физико-химического состояния

поверхностей полупроводниковых материалов системы олово – кислород путем сопоставления экспериментальных и теоретических спектров рентгеновского поглощения в ультрамягком диапазоне энергий;

**определены** формы спектров рентгеновского поглощения ближней тонкой структуры для эталонных соединений олова и его стехиометрических оксидов, что позволяет обнаруживать присутствие данных фаз в исследуемых экспериментально образцах оксидов олова;

**установлено**, что в образцах, полученных путем магнетронного напыления нанопленок олова на подложки кремния и их последующего отжига в атмосфере при  $T > 450$  °С возможно получить значительное (до 30%) содержание орторомбической фазы  $\text{SnO}_2$ , обычно получаемой при высоких давлениях;

**представлены** рекомендации по расчету спектров рентгеновского поглощения XANES в поверхностных слоях нанопленок  $\beta\text{-Sn}$  и  $\text{SnO}_2$  (Т): влияние поверхности существенно больше влияния островной дырки, поэтому можно проводить расчет спектров для основного состояния системы без учета приближения островной дырки.

#### **Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

**теоретические результаты**, представленные в работе, построены на результатах применения хорошо известных и зарекомендовавших себя методов компьютерного моделирования электронного строения полупроводниковых структур;

**идея базируется** на положениях зонной теории полупроводников, анализе и обобщении доступных теоретических и экспериментальных данных;

**установлено** качественное и количественное соответствие авторских результатов с проанализированными экспериментальными данными, а также, в частных случаях с результатами расчетов других авторов;

**использовано** современное программное обеспечение для выполнения численных расчетов и анализа полученных результатов.

**Личный вклад соискателя** состоит в непосредственном участии в формулировке проблематики, постановке и решении задач диссертации, выполнении основного объёма работы по проведению расчетов электронной



структуры исследованных материалов, получении ключевых результатов, их обработке и интерпретации, подготовке основных публикаций по выполненной работе.

Диссертация, представленная на соискание ученой степени кандидата наук, является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи, состоящей в анализе атомной и электронной структуры и свойств полупроводников на основе оксидов олова, имеющей значение для развития физики полупроводников.

В диссертации Манякина М. Д. соблюдены установленные Положением о присуждении учёных степеней критерии, которым должна отвечать диссертация на соискание учёной степени кандидата наук.

В диссертации Манякина М.Д. отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем работах, в которых изложены основные результаты диссертации.

На заседании 28 января 2021 года диссертационный совет принял решение присудить Манякину М.Д. учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за — 15, против — нет, недействительных бюллетеней — нет.

Председатель  
диссертационного совета

Ученый секретарь  
диссертационного совета



Терехов  
Владимир Андреевич

Степкин  
Владислав Андреевич

28 января 2021 года