

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Мельникова Владлена Владимировича
«Структура и спектральные свойства малых молекул и примесных центров молекулярного типа в кристаллических материалах: теория и приложения», представленной на соискание
ученой степени доктора физико-математических наук по специальности
01.04.02 – Теоретическая физика

Работа В.В. Мельникова посвящена развитию общего теоретического подхода к описанию структуры и спектральных свойств малых молекул и примесных центров молекулярного типа в кристаллических материалах. Особо следует отметить актуальность избранной темы исследования для современного полупроводникового материаловедения. Физические явления, лежащие в основе процессов формирования структуры и состояний дефектов в полупроводниковых материалах, играют определяющую роль при разработке и функционировании электронных и оптоэлектронных устройств, чем, безусловно, вызывают большой научный и практический интерес. К универсальным и надежным инструментам диагностики и изучения дефектов в полупроводниках (диэлектриках) относятся спектроскопические методы. В этом контексте, например, локализованные колебательные и/или вращательные моды, обнаруженные в инфракрасных и рамановских спектрах образца, представляют собой ценную информацию о природе дефектной структуры и всего материала. В свою очередь, успешность таких исследований в значительной степени зависит именно от адекватности физических представлений и теоретических моделей, описывающих явления и процессы в дефектосодержащих материалах, разработке которых автор диссертации уделяет повышенное внимание.

В рамках предложенного автором теоретического подхода дефектосодержащий материал рассматривается как многокомпонентная система, основными структурными элементами которой являются молекулы, кристаллы, точечные дефекты и границы раздела. Среди явных достоинств этого подхода следует отметить его направленность на изучение сложных многоатомных систем, имеющих структурно-нежесткие атомные конфигурации, описание которых выходит за рамки существующих *ab initio* методов. Представленная в работе оригинальная методика позволяет осуществить построение теоретической модели такой системы путем последовательного обобщения и комбинации моделей составляющих систему компонентов. При этом рассматриваются вопросы построения квантово-механического гамильтониана системы, описания межатомного взаимодействия, разработки и реализации методов приближённого решения возникающих многочастичных уравнений Шредингера и пр. С помощью данной методики автором успешно разработаны и исследованы новые теоретические модели структурно-нежестких молекул и комплексов дефектов в кристаллах, установлены закономерности и механизмы формирования структуры и спектральных свойств рассмотренных систем, получены новые решения актуальных спектроскопических задач.

Убедительной демонстрацией эффективности и состоятельности развитого в диссертации подхода являются результаты исследования водородсодержащих планарных дефектов в кремнии, так называемых «нанодисков». С помощью разработанных моделей автору впервые удалось описать кристаллизацию «двумерного» молекулярного водорода, заключенного в структуре планарного дефекта. Исследование структурно-фазовых состояний нанодисков показало, что локализованный в них молекулярный водород может

находиться в кристаллическом и флюидном состояниях, причем температура фазового перехода является величиной порядка 100 К. Интересно отметить, что данное значение заметно превышает температуру этого перехода, наблюдаемого в объемном H_2 . Впечатляющим результатом является выявленная в работе зависимость формы спектральной линии рамановского перехода $S_0(0)$ при гелиевых температурах от относительного содержания орто- и параводорода. Автором показано, что данная зависимость определяется преимущественно свойствами анизотропной составляющей межмолекулярного взаимодействия водорода, структурой и симметрией системы.

Полученные в диссертационной работе результаты и выводы являются новыми, обладают высокой степенью обоснованности и достоверности. Поставленные задачи соответствуют цели работы, физически корректны и значимы. Используемые в работе теоретические подходы и методы соответствуют поставленным задачам. Немаловажным является факт достойной апробации результатов диссертации на международных конференциях, а также наличие у автора значимых публикаций по теме исследования в ведущих рецензируемых научных изданиях. Автореферат имеет логически стройную и понятную структуру, хорошо оформлен, написан грамотно и позволяет получить полное представление о диссертации.

Учитывая все вышесказанное, можно сделать вывод, что диссертация Мельникова Владлена Владимировича представляет собой законченную научно-квалификационную работу, выполненную на высоком научном уровне и удовлетворяющую всем требованиям действующего Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика.

Директор ИФП СО РАН,
доктор физико-математических наук,
академик РАН

Латышев Александр Васильевич

Заместитель директора ИФП СО РАН
кандидат физико-математических наук

Каламейцев Александр Владимирович

25 сентября 2019 года

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук (ИФП СО РАН)

630090, г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 13
тел.: +7 (3833) 30-90-55; факс: +7(383)333-27-71
e-mail: latyshev@isp.nsc.ru

Подпись А.В. Латышева и А.В. Каламейцева удостоверяю
Ученый секретарь ИФП СО РАН, к.ф.-м.н.



С.А. Аржанникова