

ОТЗЫВ

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

Актуальность темы диссертации

Развитие теоретических методов описания квантовых систем, состоящих из большого количества частиц, в частности, молекул и кристаллических материалов, является актуальным направлением теоретической физики. Значительная часть современных достижений теории многоатомных систем базируется на методах расчета электронной структуры из первых принципов, при явном доминировании теории функционала плотности. Несмотря на интенсивное развитие этого направления и существенный прогресс, достигнутый, в том числе, благодаря появлению суперкомпьютеров, слабо проработанными остаются вопросы описания систем со структурно-нежесткими атомными конфигурациями, т.е. систем, физические свойства которых не удастся описать с приемлемой точностью в приближении малости смещений ядер относительно их устойчивых положений равновесия. В рамках решения данной проблемы автор рассматривает два вида таких систем – это малые молекулы и примесные центры молекулярного типа в кристаллических полупроводниковых (диэлектрических) материалах. Физическое подобие этих систем привело диссертанта к идее изучения структуры и спектральных свойств таких объектов в рамках общего теоретического подхода, который, если судить по представленным в работе результатам, показал свою состоятельность и эффективность. Все вышесказанное, вместе с повышенным научным и практическим интересом к исследованию физических явлений в молекулах и дефектосодержащих кристаллических материалах, свидетельствует о высокой важности и актуальности темы диссертационной работы В.В. Мельникова.

Структура и содержание работы

Диссертация изложена на 230 страницах и состоит из введения, пяти глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений, списка литературы, включающего 362 источника.

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулированы цель и задачи исследования, описаны методология и методы исследования, представлена научная новизна, достоверность, теоретическая и практическая значимость полученных результатов, приведены положения, выносимые на защиту.

Согласно избранной методологии исследования, дефектосодержащий кристаллический материал рассматривается как многокомпонентная система. При этом определено несколько классов основных ее составляющих, которым соответствуют молекулы, кристаллы и границы раздела. Фактически логика структуры диссертации задана этой условной классификацией. Сначала в работе

рассматриваются системы базовых классов, после чего осуществляется переход к изучению дефектов внедрения и более сложных комплексов.

Первая глава посвящена анализу существующих теоретических положений и методов, необходимых для описания структуры и физических свойств молекул и кристаллических материалов. Рассмотрены основные этапы разработки теоретической модели многоатомной системы. Представлена предложенная автором концепция и базовые элементы методики общего подхода к определению структуры и спектральных свойств малых молекул и примесных центров молекулярного типа в кристаллических полупроводниковых (диэлектрических) материалах.

Вторая глава посвящена разработке и исследованию теоретических моделей нежестких трёх- и четырёхатомных молекул. Для рассмотренных актуальных приложений проведены расчёты и анализ электронной структуры, поверхностей потенциальной энергии, матричных элементов дипольного момента. Также осуществлены вычисления ровибронных и колебательно-вращательных состояний, выявлены их структурно-энергетические особенности, представлены результаты исследования спектральных свойств.

В третьей главе решены задачи разработки и исследования теоретических моделей монокристаллических поверхностей и когерентных границ раздела в кристаллических материалах. На примере полупроводниковых (диэлектрических) материалов изучена трансформация атомной и электронной структуры при формировании границ раздела кристалл–кристалл и кристалл–газ, исследованы механизмы явлений адсорбции и адгезии на микроскопическом уровне.

Четвертая глава посвящена развитию теоретических подходов и методов к исследованию молекул внедрения в кристаллических материалах. На примере гидрогенизированного монокристаллического кремния осуществлена разработка и апробация квантово-механической модели системы молекула–матрица. Представлены результаты исследования влияния междоузельного молекулярного водорода на структуру и спектральные свойства полупроводника, получены новые представления о поведении и состояниях молекулярного дефекта внедрения в кристалле.

В пятой главе решены задачи разработки теоретических моделей комплексов точечных дефектов и планарных дефектов. Представлены результаты исследования структуры и спектральных свойств комплекса дефектов, состоящего из молекулярного водорода и вакансии, и водородсодержащих планарных дефектов в кремнии, изучены структурно-фазовые состояния двумерного молекулярного водорода, заключенного в структуре нанодиска, проведен анализ температурной зависимости формы спектральных линий рамановского перехода для различных соотношений концентрации молекул ортоводорода и параводорода.

В заключении представлены наиболее значимые результаты и выводы, полученные в диссертационной работе, указаны перспективы дальнейшей разработки темы исследования.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации

Все научные положения, выводы и рекомендации, сформулированные в диссертации, отличаются высокой степенью обоснованности. Используемые в работе подходы и методы полностью соответствуют поставленным задачам и

отвечают современному состоянию научных исследований в области теоретической физики микроскопических и макроскопических систем. Автором изучены и критически проанализированы известные достижения в области теоретической и экспериментальной физики молекул и конденсированных сред. Список литературы содержит 362 наименования, в том числе современные работы по исследованию спектральных свойств молекулярных и дефектосодержащих кристаллических систем. Прделанные в работе аналитические вычисления и численные расчеты выполнены довольно аккуратно. Разработанные теоретические модели адекватны, обладают необходимой точностью и универсальностью. Полученные в работе результаты верифицированы и успешно апробированы.

Достоверность

Необходимая достоверность полученных в диссертации результатов обеспечивается корректностью как поставленных физических задач, так и математических методов и подходов, используемых для их решения, контролем точности сопутствующих расчетов, внутренней согласованностью полученных результатов и их сопоставимостью с известными результатами других исследователей, процитированными в диссертации.

Апробация работы и публикации

По теме диссертационной работы опубликована 21 статья в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий ВАК РФ, в том числе 12 статей в зарубежных научных журналах, индексируемых в «Web of Science», и 9 статей в российских научных журналах, переводные версии которых включены в библиографическую базу данных цитирования «Web of Science». Результаты работы представлены на авторитетных международных научных конференциях и коллоквиумах.

Научная новизна

Все результаты, сформулированные в защищаемых положениях, являются новыми. К наиболее важным оригинальным научным результатам работы следует отнести развитую автором методику теоретической оценки и исследования структуры и спектральных свойств малых молекул и примесных центров молекулярного типа в кристаллических полупроводниковых (диэлектрических) материалах, а также оригинальные модели структурно-нежестких молекул и дефектосодержащих кристаллических систем. В свою очередь, разработанные теоретические модели позволили автору получить новые и значимые решения спектроскопических задач, выявить структурно-энергетические особенности состояний и механизмы формирования спектральных свойств изученных систем, получить новые представления о поведении дефектной структуры и ее влиянии на свойства кристаллических материалов.

Теоретическая и практическая значимость

Полученные в диссертации результаты и выводы являются значимыми, вносят заметный вклад в развитие теоретических методов описания многоатомных систем и представляют интерес для специалистов в области теоретической физики молекул и кристаллических материалов. Примеси и дефекты оказывают

определяющее влияние на оптические и электрические свойства полупроводников, поэтому полученные результаты будут интересны для исследователей и разработчиков полупроводниковых функциональных материалов. Разработанные теоретические модели молекул и дефектов, а также полученные на их основе новые решения спектроскопических задач имеют большое значение для развития методов диагностики, дистанционного зондирования и неразрушающего контроля разных сред и материалов.

Замечания

1. Исследование структуры и физических свойств нанодисков осуществлялось для фиксированной толщины этого планарного дефекта, определенного дилатацией кристаллической решётки $\Delta d = 4 \text{ \AA}$ (см., например, стр. 178, рисунок 5.7). Выбор значения Δd при построении модели конкретного дефекта хорошо обоснован, но не является однозначно определенным. Очевидно, что величина дилатации должна оказывать заметное влияние на свойства молекулярного водорода, заключенного в структуре нанодиска. Автору следовало бы добавить более детальное обсуждение данного вопроса.

2. В таблице 5.3 на стр. 188 приведены два набора параметров парных потенциалов (без учета и с учетом кулоновской поправки ΔQ_i), однако при исследовании кинетики и структурно-фазовых состояний молекулярного водорода в нанодисках парный потенциал, моделирующий экранированное кулоновское взаимодействие не учитывался. Автору следовало бы указать возможную область применения потенциала, заданного вторым набором параметров ($\Delta Q_i \neq 0$).

3. При построении модели двумерного кристаллизованного параводорода (чистого) использовалась суперячейка размером 3×3 (см. стр. 195). Принимая во внимание заданные периодические граничные условия с учетом взаимодействия только между ближайшими соседями, для расчета рассматриваемых вращательных состояний достаточно было бы использовать суперячейку размером 2×2 .

Дополнительно хотелось бы отметить, что диссертация стилистически хорошо оформлена, а все ее разделы согласованы между собой и связаны цельной внутренней логикой. Имеется незначительное число опечаток, что неизбежно для текстов подобного объема. Кроме того, расстановка запятых в некоторых предложениях свойственна скорее англо-саксонским текстам, что, по-видимому, объясняется тем, что диссертант больше привык писать научные тексты на английском языке, чем на русском.

Тем не менее, следует подчеркнуть, что указанные замечания не снижают общей очень высокой оценки полученных в диссертации результатов.

Заключение

Диссертационная работа Мельникова Владлена Владимировича является завершённой научно-квалификационной работой, выполненной на высоком научном уровне, написана грамотно и хорошо оформлена. Актуальность темы исследования, новизна, обоснованность и достоверность полученных результатов не вызывают сомнений. Автореферат правильно и достаточно полно отражает содержание диссертации.

Содержание диссертации соответствует специальности 01.04.02 – Теоретическая физика, согласно п. 1 «Теория конденсированного состояния

классических и квантовых, макроскопических и микроскопических систем. Изучение различных состояний вещества и физических явлений в них» и п. 4 «Квантовая теория физических явлений в ядрах, атомах и молекулах» паспорта специальности.

Диссертационная работа Мельникова Владлена Владимировича соответствует требованиям пунктов 9-11 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в редакции от 01 октября 2018 г.), а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика.

Официальный оппонент
профессор кафедры «Комплексная защита информации»
Федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего образования
«Омский государственный технический университет»
доктор физико-математических наук
(01.04.02 – Теоретическая физика)

Магазев Алексей Анатольевич

18 сентября 2019 года

644050, г. Омск, пр. Мира, д. 11
(3812) 65-34-07; magazev@mail.ru

Подпись А.А. Магазева удостоверяю

Ученый секретарь ОмГТУ



А.Ф. Немцова

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Омский государственный технический университет»
644050, г. Омск, пр. Мира, 11;
(3812) 65-34-07; info@omgtu.ru; <https://www.omgtu.ru>