

СВЕДЕНИЯ О РЕЗУЛЬТАТАХ ПУБЛИЧНОЙ ЗАЩИТЫ ДИССЕРТАЦИИ

Диссертационный совет Д 212.267.07, созданный на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», извещает о результатах состоявшейся 17 октября 2019 года публичной защиты диссертации Мельникова Владлена Владимировича «Структура и спектральные свойства малых молекул и примесных центров молекулярного типа в кристаллических материалах: теория и приложения» по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика на соискание ученой степени доктора физико-математических наук.

Присутствовали 18 из 24 членов диссертационного совета, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика:

- | | |
|--|-----------|
| 1. Багров В. Г., доктор физико-математических наук, профессор,
председатель диссертационного совета, | 01.04.02; |
| 2. Киреева И. В., доктор физико-математических наук, старший научный
сотрудник, ученый секретарь диссертационного совета, | 01.04.07; |
| 3. Бухбиндер И. Л., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.02; |
| 4. Войцеховский А. В., доктор физико-математических наук, профессор | 01.04.10; |
| 5. Давыдов В. Н., доктор физико-математических наук, старший
научный сотрудник | 01.04.10; |
| 6. Дитенберг И. А., доктор физико-математических наук, доцент, | 01.04.07; |
| 7. Коротаев А. Д., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.07; |
| 8. Коханенко А. П., доктор физико-математических наук, старший научный
сотрудник, | 01.04.10; |
| 9. Лавров П. М., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.02; |
| 10. Ляхович С. Л., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.02; |
| 11. Мельникова Н. В., доктор физико-математических наук, | 01.04.07; |
| 12. Потекаев А. И., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.07; |
| 13. Трифонов А. Ю., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.02; |
| 14. Тюменцев А. Н., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.07; |
| 15. Чумляков Ю. И., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.07; |
| 16. Шаповалов А. В., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.02; |
| 17. Шарапов А. А., доктор физико-математических наук, профессор, | 01.04.02; |
| 18. Эрвье Ю. Ю., доктор физико-математических наук, | 01.04.10. |

Заседание провел председатель диссертационного совета, доктор физико-математических наук, профессор Багров Владислав Гаврилович.

По результатам защиты диссертации тайным голосованием (результаты голосования: за присуждение ученой степени – 18, против – нет, недействительных бюллетеней – нет) диссертационный совет принял решение присудить В. В. Мельникову ученую степень доктора физико-математических наук.

**Заключение диссертационного совета Д 212.267.07,
созданного на базе федерального государственного автономного
образовательного учреждения высшего образования
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»
Министерства науки и высшего образования Российской Федерации,
по диссертации на соискание ученой степени доктора наук
аттестационное дело №_____**

решение диссертационного совета от 17.10.2019 № 26

О присуждении **Мельникову Владлену Владимировичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация **«Структура и спектральные свойства малых молекул и примесных центров молекулярного типа в кристаллических материалах: теория и приложения»** по специальности **01.04.02** – Теоретическая физика принята к защите 06.06.2019 (протокол заседания № 19) диссертационным советом **Д 212.267.07**, созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации (634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, приказ о создании диссертационного совета № 105/нк от 11.04.2012).

Соискатель **Мельников Владлен Владимирович**, 1976 года рождения.

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Теоретическое исследование некоторых явлений в молекулах XH_2 , XH_3 , HCN и CNN » по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика защитил в 2004 году в диссертационном совете государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Томский государственный университет».

Работает в должности старшего научного сотрудника лаборатории новых материалов и перспективных технологий Сибирского физико-технического института имени академика В.Д. Кузнецова в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена в лаборатории новых материалов и перспективных технологий Сибирского физико-технического института имени академика В. Д. Кузнецова федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный консультант – доктор физико-математических наук, **Потекаев Александр Иванович**, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет», Сибирский физико-технический институт имени академика В. Д. Кузнецова, директор.

Официальные оппоненты:

Поплавной Анатолий Степанович, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кемеровский государственный университет», кафедра теоретической физики, заведующий кафедрой

Бехтерева Елена Сергеевна, доктор физико-математических наук, доцент, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Исследовательская школа физики высокоэнергетических процессов, профессор

Магазев Алексей Анатольевич, доктор физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Омский государственный технический университет», кафедра «Комплексная защита информации», профессор (на момент назначения официальным оппонентом – доцент)

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южный федеральный университет», г. Ростов-на-Дону, в своем положительном отзыве, подписанном

Гуфаном Юрием Михайловичем (доктор физико-математических наук, профессор, отдел теоретической физики, заведующий отделом), указала, что развитие теоретических подходов к исследованию многоатомных систем разного класса является одним из перспективных направлений современной теоретической физики. Повышенный интерес к данному направлению вызван наличием широкого спектра фундаментальных и прикладных задач, возникающих в сопряженных отраслях науки и техники. Среди слабо разработанных проблем этого направления можно выделить ограниченность существующих теоретических подходов к изучению эффектов, обусловленных движением ядер в системах со структурно-нежесткими атомными конфигурациями. Тема диссертационной работы Мельникова В.В. лежит в рамках решения данной проблемы. В работе решен ряд ключевых вопросов построения адекватных моделей многокомпонентных систем, прогнозирования и объяснения результатов измерений, выявления механизмов и основных закономерностей наблюдаемых явлений. Полученные в диссертационной работе результаты вносят существенный вклад в развитие современной теоретической физики в области квантовой теории физических явлений в молекулах и кристаллических материалах. В. В. Мельниковым развит подход к теоретической оценке и исследованию структуры и спектральных свойств малых молекул и примесных центров молекулярного типа в кристаллических материалах; разработаны модели структурно-нежестких молекул и дефектосодержащих кристаллических систем; получены новые решения спектроскопических задач; выявлены структурно-энергетические особенности их состояний; установлены определяющие их спектральные свойства факторы; получены новые физические представления о влиянии дефектной структуры на свойства материалов. Результаты исследования вносят заметный вклад в развитие теоретических методов исследования сложных многоатомных систем. Полученные результаты представляют интерес для исследователей и разработчиков полупроводниковых материалов, развития методов диагностики и мониторинга различных объектов и сред методами ИК- и КР-спектроскопии. Результаты работы можно рекомендовать к использованию в научных и научно-образовательных

учреждениях, ведущих научно-исследовательские работы в области квантовой теории физических явлений в молекулах и кристаллических материалах, теории конденсированного состояния, теоретической молекулярной спектроскопии и спектроскопии твердого тела.

Соискатель имеет 33 опубликованных работы, в том числе по теме диссертации опубликовано 22 работы, из них в рецензируемых научных изданиях опубликована 21 работа (из них 12 статей в зарубежных изданиях, индексируемых Web of Science, и 9 статей в российских научных журналах, переводные версии которых входят в Web of Science), в сборнике трудов международной конференции, представленном в издании, входящем в Web of Science, опубликована 1 работа. Общий объем публикаций – 17,68 а.л., авторский вклад – 10,92 а.л.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации, опубликованные в журналах, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук:

1. **Melnikov V. V.** The double Renner effect in the $\tilde{X}^2A''$ and $\tilde{A}^2A'$ electronic states of HO_2 / V. V. Melnikov, T. E. Odaka, P. Jensen, T. Hirano // Journal of Chemical Physics. – 2008. – Vol. 128, is. 11. – P. 114316 (1–10). – DOI: 10.1063/1.2827490. – 1,2 / 0,8 а.л. (*Web of Science*).

2. **Melnikov V. V.** Calculation of rovibronic intensities for triatomic molecules in double-Renner-degenerate electronic states: Application to the $\tilde{X}^2A''$ and $\tilde{A}^2A'$ electronic states of HO_2 / V. V. Melnikov, P. Jensen, T. Hirano // Journal of Chemical Physics. – 2009. – Vol. 130, is. 22. – P. 224105 (1–9). – DOI: 10.1063/1.3139916. – 1,05 / 0,84 а.л. (*Web of Science*).

3. **Мельников В. В.** Структурные и энергетические особенности междоузельного молекулярного водорода в монокристаллическом кремнии /

В. В. Мельников // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2015. – Т. 147, вып. 6. – С. 1162–1169. – 0,78 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Melnikov V. V. Structural and energy properties of interstitial molecular hydrogen in single-crystal silicon / V. V. Melnikov // Journal of experimental and theoretical physics. – 2015. – Vol. 120, is. 6. – P. 1005–1011. – DOI: 10.1134/S1063776115060199.

4. **Melnikov V. V.** Roto-translational states of the interstitial molecular hydrogen in silicon: A theoretical study / V. V. Melnikov, S. N. Yurchenko // Journal of Chemical Physics. – 2015. – Vol. 143, is. 16. – P. 164305 (1–9). – DOI: 10.1063/1.4934368. – 1,0 / 0,9 а.л. (*Web of Science*).

5. **Мельников В. В.** Развитие общего подхода к моделированию свободных и локализованных многоатомных систем / В. В. Мельников, С. Н. Юрченко, П. Йенсен, А. И. Потекаев // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2015. – Т. 58, № 8. – С. 8–11. – 0,4 / 0,3 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Melnikov V. V. Development of a general approach to the modeling of free and confined polyatomic systems / V. V. Melnikov, S. N. Yurchenko, P. Jensen, A. I. Potekaev // Russian Physics Journal. – 2015. – Vol. 58, № 8. – P. 1040–1043. – DOI: 10.1007/s11182-015-0608-4.

6. **Мельников В. В.** Дефект «водород–вакансия» в монокристаллическом кремнии / В. В. Мельников // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2016. – Т. 59, № 5. – С. 14–20. – 0,67 а.л.

в переводной версии журнала, входящей в Web of Science:

Melnikov V. V. A hydrogen–vacancy defect in single-crystal silicon / V. V. Melnikov // Russian Physics Journal. – 2016. – Vol. 59, № 5. – P. 618–625. – DOI: 10.1007/s11182-016-0814-8.

7. **Melnikov V. V.** Two-dimensional H₂ in Si: Raman scattering and modeling study / V. V. Melnikov, M. Hiller, E. V. Lavrov // Physical Review B. – 2018. – Vol. 97, is. 12. – P. 125307 (1–11). – DOI: 10.1103/PhysRevB.97.125307. – 1,2 / 0,85 а.л. (*Web of Science*).

На автореферат поступило 5 положительных отзывов. Отзывы представили:

1. **Д. В. Грузнев**, д-р физ.-мат. наук, главный научный сотрудник Лаборатории «Технологии полупроводников и диэлектриков» Института автоматики и процессов управления ДВО РАН, г. Владивосток, *без замечаний*. 2. **А. В. Латышев**, д-р физ.-мат. наук, академик РАН, директор Института физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, г. Новосибирск, и **А. В. Каламейцев**, канд. физ.-мат. наук, заместитель директора Института физики полупроводников им. А. В. Ржанова СО РАН, г. Новосибирск, *без замечаний*. 3. **М. Д. Носков**, д-р физ.-мат. наук, проф., заведующий кафедрой «Физика» Северского технологического института Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ», г. Северск, *без замечаний*. 4. **О. Н. Сулакшина**, д-р физ.-мат. наук, проф., старший научный сотрудник Лаборатории теоретической спектроскопии Института оптики атмосферы им. В. Е. Зуева СО РАН, г. Томск, *без замечаний*. 5. **Н. Л. Чуприков**, д-р физ.-мат. наук, доц., профессор кафедры теоретической физики Томского государственного педагогического университета, *с замечанием*: в автореферате не дано объяснение результату, представленному в четвертой главе диссертации, согласно которому междоузельный молекулярный водород в кристалле кремния ведет себя в определенных состояниях как свободная молекула, несмотря на наличие трансляционно-вращательного взаимодействия между кристаллом и молекулой.

В отзывах отмечено, что диссертация В. В. Мельникова посвящена развитию теоретических методов описания молекулярных и кристаллических систем. Основной акцент сделан на описании эффектов, обусловленных наличием колебательных и вращательных мод в системах со структурно-нежесткими атомными конфигурациями. Проблема разработки теоретических моделей таких многоатомных систем выходит за рамки доступных квантово-механических методов расчета молекулярных и кристаллических систем, и, безусловно, является актуальной как для развития теоретической физики в данной области, так и для реализации многочисленных спектроскопических приложений. В. В. Мельниковым развит общий подход к определению структуры и спектральных свойств малых молекул и примесных

центров молекулярного типа в кристаллических материалах, достоинствами которого являются его направленность на изучение сложных многоатомных систем, имеющих структурно-нежесткие атомные конфигурации, описание которых выходит за рамки существующих *ab initio* методов; разработаны и исследованы новые теоретические модели нежестких молекул и комплексов подвижных дефектов в кристаллах, с помощью которых получены новые знания о закономерностях и механизмах формирования структуры и спектральных свойств рассмотренных физических систем; впервые описана кристаллизация «двумерного» молекулярного водорода, заключенного в структуре планарного дефекта; выявлена зависимость формы спектральной линии рамановского перехода $S_0(0)$ при гелиевых температурах от относительного содержания орто- и параводорода, определяющаяся преимущественно свойствами анизотропной составляющей межмолекулярного взаимодействия водорода, структурой и симметрией системы. При подборе модельных физических систем для приложения, апробации и проверки своих теоретических построений автор руководствовался не только требованием их универсальности и фундаментальной значимости, но и практической востребованностью результатов исследования для развития современных научно-технических направлений. Совокупность теоретических положений и результатов, полученных в диссертационной работе, можно квалифицировать как новое научное достижение в области теоретической физики.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что **А. С. Поплавной** является известным специалистом в области квантовой теории физических явлений в конденсированных средах; **Е. С. Бехтерева** является высококвалифицированным специалистом в области квантовой теории физических явлений в молекулах; **А. А. Магазев** является высококвалифицированным специалистом в области теоретической физики классических и квантовых систем; в **Южном федеральном университете** работают квалифицированные специалисты по направлению 01.04.02 – Теоретическая физика, известные своими достижениями в области теоретической физики и, в частности, в области квантовой теории физических явлений в молекулах, теории конденсированного состояния классических и квантовых, макроскопических и микроскопических систем.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана научная концепция общего подхода к определению структуры и спектральных свойств малых молекул и примесных центров молекулярного типа в кристаллических полупроводниковых (диэлектрических) материалах;

предложена оригинальная методика теоретической оценки и исследования структуры и спектральных свойств малых молекул и примесных центров молекулярного типа в кристаллических материалах, оригинальные теоретические модели структурно-нежестких молекул и подобных молекулам комплексов дефектов в кристаллических материалах, новые методы расчета колебательно-вращательных спектров таких систем;

доказана перспективность использования предложенного в работе подхода к изучению эффектов, обусловленных движением ядер в системах со структурно-нежесткими атомными конфигурациями; доказано наличие локализованных вращательных мод и делокализованных вращательных возбуждений (волн углового момента), ассоциированных с молекулярным водородом, в гидрогенизированном кристаллическом кремнии;

введено использование общей трактовки таких понятий, как примесный центр молекулярного типа, молекула внедрения, молекулярный дефект внедрения, молекулоподобный комплекс дефектов.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказана применимость предложенной в работе методики для построения и исследования обобщенных квантово-механических моделей молекул и подобных молекулам комплексов дефектов в кристаллических материалах, а также адекватность разработанных с ее помощью теоретических моделей, расширяющих границы применимости теоретических методов описания квантовых систем, состоящих из большого количества частиц, вносящих вклад в расширение представлений о влиянии дефектов на структуру и свойства кристаллических материалов;

применительно к проблематике диссертации результативно использован комплекс существующих теоретических положений и методов, необходимых для изучения структуры и свойств многоатомных систем различного типа, включая методы приближенного решения многочастичного уравнения Шредингера и вычислительные методы математической физики;

изложены основные этапы разработки и апробации оригинальной методики, позволяющей реализовать общий подход к теоретической оценке и исследованию структуры и свойств рассматриваемых молекул и дефектосодержащих кристаллических материалов, включая разработку соответствующего инструментария – моделей и вычислительного аппарата;

раскрыты механизмы и закономерности формирования спектроскопических свойств изученных систем, выявлены структурно-энергетические особенности их состояний, что стало возможным только благодаря адекватному описанию структурной нежесткости в разработанных теоретических моделях молекул и дефектосодержащих кристаллических материалов;

изучены факторы, определяющие структуру и спектральные свойства рассмотренных систем; *изучены* причинно-следственные связи трансформации атомной и электронной структуры с перестройкой колебательных и вращательных мод в этих системах;

проведена модернизация методов численного решения многочастичного уравнения Шредингера, необходимых для построения и реализации алгоритмов расчета состояний системы, обусловленных движением ядер, обеспечившая получение новых результатов исследования структуры и спектральных свойств рассмотренных дефектосодержащих кристаллических материалов.

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

разработаны и внедрены новые методы и алгоритмы расчета колебательно-вращательных спектров молекул и молекулоподобных дефектов в полупроводниках (диэлектриках), прошедшие успешную верификацию и апробацию на ряде актуальных приложений;

определены перспективы практического использования разработанных теоретических моделей для реализации диагностики дефектов в полупроводниках;

представлены рекомендации для разработки схемы и оптимизации условий экспериментального исследования структуры и спектральных свойств рассмотренных систем.

Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования. Полученные результаты могут быть использованы в научных и научно-образовательных учреждениях, ведущих научно-исследовательские работы по схожим и смежным тематикам, например в Национальном исследовательском Томском государственном университете, Национальном исследовательском Томском политехническом университете, Уральском федеральном университете имени первого Президента России Б.Н. Ельцина (г. Екатеринбург), Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, Институте физики полупроводников имени А.В. Ржанова СО РАН (г. Новосибирск), Институте оптики атмосферы имени В.Е. Зуева СО РАН (г. Томск), Институте физики твердого тела РАН (г. Черноголовка), Физико-техническом институте имени А.Ф. Иоффе РАН (г. Санкт-Петербург).

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

теория построена на известных и проверенных фактах, хорошо согласуется с опубликованными экспериментальными данными по теме диссертации и по смежным отраслям;

идея базируется на анализе существующих теоретических подходов и методов, на обобщении и комбинации известных теоретических моделей многоатомных систем (наряду с разработкой новых);

использованы корректные теоретические подходы и методы, соответствующие поставленным в диссертационной работе задачам и отвечающие современному состоянию исследований в области теоретической физики микроскопических и макроскопических систем;

установлено качественное и количественное согласие авторских результатов с соответствующими результатами экспериментальных и теоретических исследований, представленными в независимых источниках.

Научная новизна результатов диссертационной работы заключается в том, что в ней развит общий подход к определению (вычислению) структуры и спектральных свойств малых молекул и примесных центров молекулярного типа в кристаллических материалах. В рамках данного подхода наиболее «сложная» система – дефектосодержащий кристаллический материал – рассматривается как многокомпонентная система, составными элементами которой одновременно являются как локализованные объекты, так и пространственно-распределенные структуры. В основе предложенного подхода лежит разработанная автором унифицированная процедура (общая методика), включающая единый согласованный комплекс конкретных приемов и способов построения теоретических моделей молекулярных и дефектосодержащих кристаллических систем, в том числе со структурно-нежесткими атомными конфигурациями, а также набор методов приближенного решения возникающих многочастичных уравнений Шредингера. Иерархия теоретических моделей, разработанных в диссертации и самостоятельно представляющих значимый результат, дала возможность автору успешно реализовать исследование ряда структурно-нежестких молекул и подобных молекулам комплексов дефектов, имеющих важное теоретическое и практическое значение. В работе получены новые решения спектроскопических задач, выявлены особенности структуры и состояний изученных систем, установлены факторы, отвечающие за формирование их спектральных свойств, получены новые представления о поведении дефектных структур и механизмах их влияния на свойства кристаллических материалов.

Личный вклад соискателя состоит в: непосредственном участии в постановке цели и задач исследования, анализе и обсуждении результатов, формулировке научных положений, выносимых на защиту, подготовке публикаций по теме исследования. Все результаты, вошедшие в диссертацию, получены автором лично, как в индивидуальных, так и в коллективных исследованиях.

Диссертация отвечает критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней для диссертаций на соискание ученой степени доктора наук, и, в соответствии с пунктом 9 Положения, является научно-квалификационной

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.02 – Теоретическая физика, участвовавших в заседании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за – 18, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

диссертационного совета

Ученый секретарь
диссертационного совета

Багров Владислав Гавриилович

Киреева Ирина Васильевна

17.10.2019