

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Бакулина Александра Викторовича «Адсорбция галогенов на поверхности (001) соединений $A^{III}B^V$ и интерфейсные свойства границ раздела $A^{III}B^V$ /сплав Гейслера», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Теоретическая работа Бакулина Александра Викторовича посвящена исследованию влияния галогенов на электронную структуру и физико-химические свойства поверхности соединений $A^{III}B^V$, широко используемых в спинтронике, оптоэлектронике, микроэлектронике. Поскольку поверхности соединений $A^{III}B^V$ обнаруживают большое разнообразие свойств в зависимости от ориентации, структуры и состава, а также дефектов и адсорбированных атомов, необходимо детально изучение атомную и электронную структуру различных реконструкций поверхности, при этом важно выявить закономерности формирования химических связей в поверхностных слоях при адсорбции галогенов. Уже на основании этого представленная работа актуальна.

Вычисления электронной структуры выполнены в рамках приближения функционала электронной плотности. В расчетах учтена реконструкция поверхности и атомные релаксации. В результате анализа полученных данных установлено, что галогены F, Cl, Br и I взаимодействуют, в основном, с димерными атомами элементов третьей группы на поверхности. Показано, что при увеличении концентрации галогенов, по мере насыщения катионов на поверхности, происходит разрушение связей в поверхностных и даже в приповерхностных димерах. Интересны результаты исследования электронных и магнитных свойств при таких составах контактных слоев на границе раздела (110), когда достигается полная, или почти полная спиновая поляризация.

Непротиворечивость представленных результатов вычислений, их согласие с экспериментальными и теоретическими данными, имеющимися в литературных источниках, подтверждает достоверность результатов работы.

В целом работа выполнена на высоком научном уровне, в достаточной мере апробирована. Основные результаты отражены в публикациях, приведенных в автореферате.

Считаю, что диссертационная работа Бакулина Александра Викторовича удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Доктор физико-математических наук,
профессор кафедры «Физика»
Алтайского государственного технического
университета им. И.И. Ползунова
Адрес: 656038, г. Барнаул, пр. Ленина, 46.
Email: altgtu@list.ru



Попов Попов Валерий Андреевич
Email: pva@mail.ru
2 октября 2015 года

Подпись заверяю:
К. Коваленко