

## 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

Актуальность работы связана с тем, что процессы, протекающие на поверхности низко-размерных структур, влияют на их физико-химические свойства, и зачастую являются определяющими. Однако экспериментальные исследования не всегда позволяют получить детальное, атом-разрешенное описание поверхности и интерфейсов. В той связи теория функционала плотности является мощным инструментом определения атомарной и электронной структуры nano-размерных систем и позволяет не только объяснить наблюдаемые эффекты, но и предсказать новые, иногда задав неожиданный вектор развития материалов.

В диссертационной работе Бакулина Александра Викторовича была поставлена задача - изучить процессы, протекающие на поверхности nano-размерных систем, и структуру и свойства границ раздела. В первой части своей работы (главы 2 - 4) автор сосредоточился на систематическом исследовании взаимодействия галогенов (F, Cl, Br и I) с соединениями  $A^{III}B^V$  (GaAs, InAs, GaP и InP), что позволило ему проследить различные закономерности при замене, как катионов, так и анионов. Вторая часть работы Бакулина А. В. (глава 5) посвящена исследованию границ раздела соединений  $A^{III}B^V$  с полуметаллическими сплавами Гейслера (NiMnSb,  $Co_2CrZ$ ,  $Co_2MnZ$ , где  $Z = Ga, Si, Al$ ), что является чрезвычайно актуальным в свете разработки новых гибридных структур.

На основании проведенных Бакулиным А. В. систематических расчетов адсорбции галогенов в поверхностных слоях  $A^{III}B^V$  с различными реконструкциями были получены результаты, подтверждающие представление о селективности химической связи на поверхности. Интересно отметить увеличение спиновой поляризации на контакте InP-SbNi, полученное автором.

Таким образом, работу можно охарактеризовать как фундаментальную с применением теории функционала плотности к исследованию процессов, протекающих на поверхности, и интерфейсов nano-размерных структур. Общее количество публикаций 21 из них 13 публикаций в российских и зарубежных журналах из перечня ВАК.

К недостаткам автореферата следует отнести то, что в нем недостаточно четко представлено сопоставление теоретических результатов автора с экспериментальными данными, хотя в разделе «Объекты и методы исследований» автор пишет, что по данным системам накоплен большой экспериментальный материал. Кроме того при описании результатов, представленных во второй главе, на 8-й странице автореферата автор пишет: «Отмечается, что влияние химического состава катионов отражается в меньшей степени на электронных характеристиках поверхности, чем анионов», однако объяснение наблюдаемого эффекта не предложено.

Тем не менее, указанные недостатки не снижают ценности полученных результатов. Содержащиеся в автореферате материалы адекватно отражают суть исследования, использованные автором методы, достоверность и обоснованность положений, выносимых на защиту.

Работа Бакулина А. В. удовлетворяет всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением №842 Правительства РФ от 24.09.2013г., предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Бакулин Александр Викторович заслуживает присуждения ему ученой степени физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Дата 01.10.2015

Доцент кафедры ядерно-физических методов исследования  
Кандидат физико-математических наук

Эл. почта: [marina.shelvapina@spbu.ru](mailto:marina.shelvapina@spbu.ru)

М. Г. Шеляпина

(Марина Германовна Шеляпина)

ПОДПИСЬ РУКИ  
ЗАВЕРЯЮ. НАЧАЛЬНИК  
ОТДЕЛА КАДРОВ  
Н.И. МАШТЕПА



Федеральное Государственное Бюджетное Образовательное Учреждение Высшего  
Образования «Санкт-Петербургский государственный университет» (СПбГУ)

Адрес: Россия, 199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб. д.7-9.

Тел: +7 (812) 328-20-00

Факс: +7 (812) 328-97-88

Эл. почта: [spbu@spbu.ru](mailto:spbu@spbu.ru)