

Отзыв

научного руководителя доктора физико-математических наук С.Е. Кульковой на диссертацию А.В. Бакулина «Адсорбция галогенов на поверхности (001) соединений $A^{III}B^V$ и интерфейсные свойства границ раздела $A^{III}B^V$ / сплав Гейслера», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Соединения на основе элементов третьей и пятой группы широко используются в микроэлектронике, оптоэлектронике, спинтронике и других отраслях. На их основе разрабатываются новые гибридные материалы для современной индустрии. Экспериментальные и теоретические исследования соединений $A^{III}B^V$ показывают, что их электронные свойства зависят как от атомного состава материалов, так и формирующихся структур на их поверхности. С помощью различных адсорбатов можно модифицировать поверхностные свойства соединений $A^{III}B^V$, а также влиять на реконструкционные превращения на поверхности. Теоретическое изучение взаимодействия адсорбатов с поверхностью соединений $A^{III}B^V$ позволяет продвинуться в понимании механизмов их влияния на физические свойства поверхности, что необходимо в том числе для развития новых технологий ее модификации. В последние годы увеличивается также внимание к изучению интерфейсных свойств гибридных структур, включающих соединения $A^{III}B^V$ и сплавы Гейслера, что обусловлено их интересными полуметаллическими свойствами и возможностью использования таких материалов в спинтронике. Поскольку свойства поверхностей материалов и внутренних границ раздела определяются, прежде всего, особенностями их атомной и электронной структуры, то необходимо проведение корректных расчетов данных характеристик с использованием первопринципных методов теории функционала электронной плотности. Эти методы позволяют эффективно изучать поверхностные реконструкции и интерфейсные структуры с учетом полной релаксации атомных позиций и рассчитывать с высокой точностью такие характеристики как энергии связи адсорбатов на поверхности, энергию адгезии, спиновую поляризацию и др. Известно, что электронные свойства поверхностей и интерфейсов обнаруживают сильную зависимость от их ориентации, структуры и состава, а также дефектов и адсорбированных атомов. Сложность в исследовании полярной поверхности (001) соединений $A^{III}B^V$ заключается в многообразии формирующихся поверхностных структур в зависимости от соотношения элементов III и V группы, а также способа ее приготовления. В рамках развития технологий атомно-слоевого травления, которое заключается в последовательном удалении отдельных атомов или слоев кристалла, необходимо понимание микроскопического механизма селективного взаимодействия адсорбатов с элементами III и V групп на поверхности. В этой связи диссертационная работа А.В. Бакулина, целью которой было теоретическое систематическое исследование влияния особенностей атомной и электронной структуры поверхности соединений $A^{III}B^V$ на природу химической связи с галогенами и с полуметаллическими сплавами Гейслера несомненно является актуальной и представляет значительный интерес.

Цели работы, методы исследования, полученные результаты и их анализ, научная и практическая ценность, а также выводы изложены в диссертации и отражены в автореферате.

К основным результатам, представляющим научную новизну, следует отнести результаты систематического исследования взаимодействия галогенов в зависимости от их концентрации на поверхности $A^{III}B^V(001)$ с реконструкцией $\zeta(4 \times 2)$, которые показали, что все рассмотренные галогены (F, Cl, Br, I) предпочитают взаимодействовать с поверхностными димерными атомами элементов третьей группы. При малых концентрациях галогенов лишь фтор, внедряясь в позицию между поверхностными димерами в случае InAs, ведет к разрыву димерных связей. Впервые изучено влияние концентрации галогенов на атомную и электронную структуру катион-обогащенной поверхности с реконструкцией $\zeta(4 \times 2)$. Показано, что насыщение всех катионных позиций на поверхности ведет к разрыву связей в поверхностных и подповерхностных димерах, что ведет к превращению (4×1) .

Несомненно, большой интерес представляет изучение адсорбции галогенов на реконструкциях с геометрией $\beta 3'(4 \times 2)$, (2×4) со структурой смешанного димера, $\beta 2(2 \times 4)$, которое показали, что независимо от реконструкции поверхности позиции над элементами третьей группы остаются более предпочтительными для адсорбции галогенов, чем позиции над элементами пятой группы. Также необходимо отметить впервые проведенные теоретические оценки влияния галогенов на ослабление связей в поверхностных слоях соединений $A^{III}B^V$. В целом эти исследования позволили вскрыть природу и механизмы влияния галогенов на структурные, электронные и энергетические характеристики поверхности соединений $A^{III}B^V$.

В работе также было проведено детальное изучение электронных и магнитных свойств границ раздела (110) сплав Гейслера – $A^{III}B^V$ в зависимости от состава контактных слоев и показано, что хотя бы для одной из изученных 4-6 структур возможно достижение 100 % спиновой поляризации. Данное заключение справедливо как для сплавов состава XYZ, так и X_2YZ .

В целом, настоящая работа выполнена на высоком научном уровне, результаты работы опубликованы в авторитетных российских и зарубежных журналах. Диссертация удовлетворяет всем предъявленным требованиям, а сам диссертант, А.В. Бакулин заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Скученко

Кулькова Светлана Евгеньевна,
доктор физико-математических наук, профессор,
главный научный сотрудник лаборатории физики нелинейных сред
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук,
634055, Россия, Томск, пр. Академический 2/4, www.ispms.ru
e-mail: root@ispms.tomsk.ru
тел. +7 (3822) 49-18-81

