

ОТЗЫВ

официального оппонента Уздина Валерия Моисеевича на диссертацию Бакулина Александра Викторовича «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.

Развитие физических и технологических подходов к созданию новых материалов для электронных устройств и приборов спинтроники является одним из актуальных научных направлений. Разработка новых материалов невозможна без детального понимания природы их физико-химических свойств на атомном уровне. При этом нужно учитывать, что явления и процессы, протекающие на поверхности материалов, оказывают существенное влияние на их свойства и могут являться определяющими при создании перспективных материалов с заранее заданными свойствами. В последние десятилетия особый интерес вызывают соединения элементов третьей и пятой групп и гибридные структуры на их основе вследствие широкого практического применения этих материалов. Для многих технологических приложений качество поверхности полупроводниковых соединений $A^{III}B^V$, а также их границ раздела играет важную роль, поскольку их электронные свойства сильно зависят от дефектов структуры. Так как экспериментальные методы исследования не всегда позволяют выявить закономерности и особенности процессов, протекающих на границах раздела, то необходимо привлечение современных теоретических методов изучения атомной и электронной структуры низкоразмерных материалов. Здесь особую роль играют первопринципные вычислительные методы, позволяющие корректно описывать свойства уже известных материалов и даже прогнозировать свойства новых.

Одним из подходов к направленному изменению структуры и состава поверхности служит атомно-слоевое травление, которое, в случае соединений $A^{III}B^V$, может быть реализовано путем адсорбции атомов различной природы, селективно взаимодействующих с определенными атомами поверхности, уменьшая их энергию связи. В качестве таких адсорбатов могут выступать галогены и щелочные металлы. Новым направлением применения полупроводниковых соединений III-V группы является их использование в качестве подложек для гетероструктур с полуметаллическими сплавами Гейслера, служащими источниками спин-поляризованных электронов в приборах спинтроники. На поверхности и интерфейсах эти сплавы могут терять полуметаллические свойства. Поэтому для их практических применения необходимо понимание структурных и электронных факторов, ответственных за потерю спиновой поляризации на границах раздела. Несмотря

на имеющиеся в этой области экспериментальные работы, информация о механизмах взаимодействия адсорбатов с элементами разных групп на поверхности и об их влиянии на энергию связи поверхностных атомов практически отсутствует.

Диссертационная работа Бакулина А.В. посвящена систематическому теоретическому исследованию взаимодействия атомарных галогенов с реконструированной поверхностью (001) полупроводников GaAs, InAs, GaP и InP, а также изучению свойств их границ раздела с полуметаллическими сплавами Гейслера. Тема исследования безусловно является актуальной.

Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы из 230 библиографических ссылок, а также трех приложений. Объем диссертации составляет 197 страниц, включая 107 рисунков и 43 таблицы. Главы сопровождаются кратким обзором литературы и выводами.

В первой главе представлен обзор методов расчета электронной структуры твердых тел, дано представление о теории функционала электронной плотности, описаны методы псевдопотенциала и проекционных присоединенных волн. Отдельный параграф посвящен тестовым расчетам различных характеристик соединений $A^{III}B^V$. Использование современных, хорошо апробированных методов расчета свидетельствует о надежности и достоверности полученных результатов.

В главах со второй по пятую излагаются новые оригинальные результаты, полученные автором работы. Вторая глава посвящена расчетам энергии формирования различных реконструкций поверхности (001) полупроводников GaAs, InAs, GaP и InP. Показано, что структура $\zeta(4 \times 2)$ является устойчивой в случае GaAs и InAs и имеет наименьшую поверхностную энергию среди реконструкций (4×2) в случае GaP и InP. В катион-обогащенном пределе на поверхности (001) для всех рассмотренных соединений стабильной оказалась реконструкция (2×4) со смешанным димером. В целом продемонстрированы общие тенденции в формировании стабильных реконструкций на поверхности (001) рассмотренных соединений. Анализируются особенности атомной и электронной структуры устойчивых реконструкций. В этой главе автор обсуждает новую реконструкцию (4×4) , предложенную для галлий-обогащенной поверхности GaAs(001). Небольшая разница в энергиях между этой (4×4) реконструкцией и структурой (2×4) со смешанным димером позволяет предположить, что при нормальных условиях эти реконструкции могут сосуществовать на поверхности. В третьей главе рассматривается адсорбция атомарных галогенов с катион-обогащенной поверхностью $A^{III}B^V(001)$ с $\zeta(4 \times 2)$ реконструкцией. Проводится сравнительный анализ влияния галогенов на межатомные длины связей, электронные энергетические спектры поверхности и распределений зарядовой плотности в поверхностных слоях в зависимости от электронной структуры адатома галогена и его позиции на поверхности. Здесь же рассматривается влияние

концентрации галогенов, и проводятся оценки ослабления связей поверхностных атомов вследствие адсорбции галогенов. Четвертая глава посвящена изучению адсорбции галогенов на поверхности $A^{III}B^V(001)$ с другими реконструкциями, в том числе на анион-стабилизированной поверхности. В целом галогены демонстрируют одинаковые тенденции в образовании химической связи на поверхности $A^{III}B^V(001)$ независимо от ее химического состава и структуры. Наконец, в пятой главе приводятся результаты изучения электронной структуры границ раздела между полупроводниками $A^{III}B^V$ и полуметаллическими сплавами Гейслера. Основным результатом данной главы является вывод о возможности достижения 100% спиновой поляризации на границах раздела с ориентацией (110).

Научные положения и выводы диссертационной работы представляются достаточно обоснованными благодаря четкой постановке задач и комплексным подходом к их решению с применением современных теоретических методов. При обсуждении и сравнении полученных результатов диссертант использовал данные как российских так и зарубежных ученых. О полноте и достоверности результатов проведенного исследования может свидетельствовать и наличие 13 публикаций в печатных изданиях, входящих в перечень ВАК и в библиографическую базу Web of Science. Основные результаты диссертации были доложены на более чем 20 всероссийских и международных научных конференциях.

Полученные результаты проясняют механизмы взаимодействия галогенов с полупроводниковой поверхностью $A^{III}B^V(001)$, природу интерфейсных состояний и механизмов связи пленка – подложка, способствуют развитию комплексных представлений о природе сложных поверхностных и интерфейсных явлений. Они, несомненно, имеют высокую научную и практическую значимость.

При оценке диссертационной работы необходимо отметить некоторые недостатки:

1. В работе не приводится никакого обоснования используемых параметров расчета: числа атомных слоев, числа k -точек, энергии обрезания плоских волн и др., а также нет тестов сходимости хотя бы по основным параметрам.
2. В диссертационной работе присутствует достаточно большое число электронных энергетических спектров, но автор нигде в тексте не приводит обоснование выбора нулевого уровня на энергетической шкале.
3. Было бы целесообразно более подробно обсудить соответствие между результатами расчетов и экспериментальными данными, имеющимися в литературе; сформулировать, что конкретно было объяснено и какие из полученных результатов подтверждаются экспериментом.

Указанные замечания не снижают значимости исследований и общей положительной оценки работы. Полученные А.В. Бакулиным результаты имеют большое значение для

