

## 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 29 октября 2015 года публичной защиты 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» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Время начала заседания: 17-30.

Время окончания заседания: 19-10.

На заседании диссертационного совета присутствовали 17 из 24 членов диссертационного совета, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния:

1.	Ивонин И.В., заместитель председателя диссертационного совета	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
2.	Киреева И.В., ученого секретаря диссертационного совета	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
3.	Бордовицын В.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
4.	Брудный В.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
5.	Гермогенов В.П.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
6.	Дударев Е.Ф.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
7.	Караваев Г.Ф.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
8.	Коротаев А.Д.,	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
9.	Ляхович С.Л.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
10.	Мельникова Н.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
11.	Потекаев А.И.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
12.	Старенченко В.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
13.	Трифонов А.Ю.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
14.	Тюменцев А.Н.	д-р физ.-мат. наук	01.04.07
15.	Тютюрев В.Г.	д-р физ.-мат. наук	01.04.10
16.	Шаповалов А.В.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02
17.	Шарапов А.А.	д-р физ.-мат. наук	01.04.02

**Заседание провёл заместитель председателя диссертационного совета, доктор физико-математических наук Ивонин Иван Варфоломеевич.**

По результатам защиты диссертации тайным голосованием (результаты голосования: за присуждение ученой степени – 17, против – нет, недействительных бюллетеней – нет) диссертационный совет принял решение присудить А.В. Бакулину учёную степень кандидата физико-математических наук.

**Заключение диссертационного совета Д 212.267.07**

**на базе федерального государственного автономного образовательного  
учреждения высшего образования**

**«Национальный исследовательский Томский государственный университет»**

**Министерства образования и науки Российской Федерации**

**по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук**

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 29.10.2015 г., № 41

О присуждении **Бакулину Александру Викторовичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «**Адсорбция галогенов на поверхности (001) соединений  $A^{III}B^V$  и интерфейсные свойства границ раздела  $A^{III}B^V$  / сплав Гейслера**» по специальности **01.04.07** – Физика конденсированного состояния, принята к защите 07.07.2015 г., протокол № 30, диссертационным советом Д 212.267.07 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 № 798-745/68 от 13.04.2007 г.).

Соискатель **Бакулин Александр Викторович**, 1989 года рождения.

В 2012 г. соискатель окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

В 2015 г. соискатель очно окончил аспирантуру федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук.

Работает в должности инженера-исследователя лаборатории теоретической и математической физики в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Диссертация выполнена в лаборатории физики нелинейных сред федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук Федерального агентства научных организаций и в лаборатории теоретической и математической физики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, **Кулькова Светлана Евгеньевна**, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория физики нелинейных сред, главный научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

**Уздин Валерий Моисеевич**, доктор физико-математических наук, профессор, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования (на момент назначения официальным оппонентом – федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования) «Санкт-Петербургский государственный университет», кафедра статистической физики, профессор

**Жачук Руслан Анатольевич**, кандидат физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук, лаборатория молекулярно-лучевой эпитаксии элементарных полупроводников и соединений  $A^{III}B^V$ , старший научный сотрудник

дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация – федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «**Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого**», г. Санкт-Петербург, в своем положительном заключении, подписанном **Ивановым Вадимом Константиновичем** (доктор физико-математических наук, кафедра экспериментальной физики, заведующий кафедрой), указала, что механизмы

взаимодействия галогенов с полярной  $A^{III}B^V(001)$  поверхностью остаются до конца не ясными, что обусловлено разнообразием формирования поверхностных реконструкций в зависимости от химического состава поверхности. Кроме того, изучение интерфейсных свойств наноструктур на основе сплавов Гейслера и полупроводников  $A^{III}B^V$ , перспективных для создания приборов для спинтроники и других приложений, является перспективным направлением современной физики конденсированного состояния и актуальность такого рода исследований не вызывает сомнений. Проведенные в диссертационной работе расчеты из первых принципов электронной структуры и физико-химических свойств поверхности соединений  $A^{III}B^V$  и границ раздела на их основе позволяют не только дополнить экспериментальные исследования, но и продвинуться в понимании свойств низкоразмерных структур. К наиболее значимым результатам относятся: установленные механизмы взаимодействия галогенов на поверхности  $A^{III}B^V(001)$  в зависимости от ее химического состава и реконструкции; выявленная природа ослабления связей в поверхностных слоях вследствие адсорбции галогенов и проведенные численные оценки этого эффекта; установленные особенности влияния концентрации галогенов на атомную и электронную структуру поверхности  $A^{III}B^V(001)$  с реконструкцией  $\zeta(4 \times 2)$  и предсказание разрыва всех поверхностных и подповерхностных димерных связей при покрытии в 0.75 монослоя; выявленные структурные и электронные факторы, способствующие увеличению спиновой поляризации на границе раздела между полуметаллическими сплавами Гейслера  $NiMnSb$ ,  $Co_2YZ$  ( $Y = Cr, Mn$ , а  $Z = Si, Al, Ge$ ) и полупроводниками  $A^{III}B^V$ . Полученные результаты могут быть использованы в научных и учебных организациях, в которых ведутся исследования по близкой тематике, для дальнейшего развития представлений о взаимодействии адсорбатов и тонких пленок с поверхностями соединений  $A^{III}B^V$ , а также для совершенствования технологии атомно-слоевого травления и получения структур с высокой степенью спиновой поляризации.

Соискатель имеет 62 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации – 21 работу, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 13 (из них 7 статей в зарубежных журналах, включенных в Web of Science, и 6 статей в российских журналах, переводные версии которых включены в Web of Science), в сборниках материалов международных и всероссийских научных конференций – 8. Общий объем публикаций – 10,19 п.л., авторский вклад – 5,16 п.л.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации, опубликованные в журналах, включенных в Перечень российских рецензируемых научных журналов, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук:

1. **Bakulin A.V.**, Kulkova S.E., Ereemeev S.V., Tereshchenko O.E. Early stages of halogen adsorption on cation-rich InAs(001): surface etching mechanism // J. Phys. Chem. C. – 2014. – Vol. 118. – P. 10097–10105. – 1.07 / 0.54 п.л.

2. **Bakulin A.V.**, Kulkova S.E., Ereemeev S.V., Tereshchenko O.E. Ab-initio study of new Ga-rich GaAs(001) surface (4×4) reconstruction // Surf. Sci. – 2013. – Vol. 615. – P. 97–102. – 0.66 / 0.33 п.л.

3. **Бакулин А.В.**, Еремеев С.В., Терещенко О.Е., Кулькова С.Е. Адсорбция хлора на поверхности InAs(001) // Физика и техника полупроводников. – 2011. – Т. 45, № 1. – С. 23–31. – 0.74 / 0.37 п.л.

*в переводной версии журнала:*

**Bakulin A.V.**, Ereemeev S.V., Tereshchenko O.E., Kulkova S.E. Chlorine adsorption on the InAs (001) surface // Semiconductors. – 2011. – V. 45, iss. 1. – P. 21–29. – 0,56 / 0,28 п.л. – DOI: 10.1134/S1063782611010040

4. Еремеев С.В., **Бакулин А.В.**, Кулькова С.Е. Электронная структура и спиновая поляризация на границе раздела NiMnSb/GaAs(110) // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2009. – Т. 136, № 2(8). – С. 393-399. – 0.41 / 0.22 п.л.

*в переводной версии журнала:*

Ereemeev S.V., **Bakulin A.V.**, Kul'kova S.E. Electronic Structure and Spin Polarization at the NiMnSb/GaAs(110) Interface // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2009. – V. 109, iss. 2. – P. 339-344. – 0,41 / 0,22 п.л. – DOI: 10.1134/S1063776109080202

5. **Бакулин А.В.**, Еремеев С.В., Кулькова С.Е. Теоретическое исследование границы раздела (110) между полными сплавами Гейслера и GaAs // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2010. – Т. 53, № 3. – С. 14–19. – 0.45 / 0.23 п.л.

*в переводной версии журнала:*

**Bakulin A.V.**, Ereemeev S.V., Kulkova S.E. Theoretical investigations of the (110) interface between the full heusler alloys and GaAs // Russian Physics Journal. – 2010. – V. 53, Is. 3. – P. 225-230. – 0,35 / 0,18 п.л.



6. **Bakulin A.**, Ponomarev A., Kulkova S. Ab-initio study of cation-rich InP(001) and GaP(001) surface reconstructions and iodine adsorption // IOP Conf. Series: Mat. Sci. Eng. – 2015. – Vol. 77. – P. 012004-1–5. – 0.41 / 0.21 п.л.

На диссертацию и автореферат поступили 12 положительных отзывов. Отзывы представили: 1. **В.А. Попов**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры «Физика» Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, г. Барнаул, *без замечаний*. 2. **Л.В. Добышева**, д-р физ.-мат. наук, ведущий научный сотрудник отдела физики и химии наноматериалов Физико-технического института УрО РАН, г. Ижевск, *без замечаний*. 3. **А.Ю. Захаров**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры общей и экспериментальной физики Новгородского государственного университета имени Ярослава Мудрого, г. Великий Новгород, *без замечаний*. 4. **Н.А. Валишева**, канд. хим. наук, старший научный сотрудник лаборатории физических основ интегральной микроэлектроники Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН, г. Новосибирск, *без замечаний*. 5. **С.Г. Овчинников**, д-р физ.-мат. наук, проф., заместитель директора Института физики им. Л.В. Киренского СО РАН, г. Красноярск, *с замечанием*: очень мелкие рисунки. 6. **В.В. Илясов**, д-р техн. наук, профессор кафедры физики Донского государственного технического университета, г. Ростов-на-Дону, *с замечанием*: на защиту выносятся пять положений, которых могло бы хватить на докторскую диссертацию; очевидно, поэтому некоторые положения (например, положение № 5) недостаточно полно изложены в тексте автореферата. 7. **А. Постников**, д-р физ.-мат. наук, профессор Лотарингского университета, Мец, Франция, *с замечаниями*: не проведено обсуждение влияния фононных вкладов в энтропию; не проведено обсуждение влияния спин-орбитального взаимодействия на зонную структуру рассматриваемых полупроводников. 8. **Ю.Х. Векилов**, д-р физ.-мат. наук, профессор кафедры теоретической физики и квантовых технологий Национального исследовательского технологического университета «МИСиС», г. Москва, *с замечаниями*: мелкие рисунки; наличие ряда стилистических и грамматических ошибок. 9. **М.Г. Шеляпина**, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры ядерно-физических методов исследования Санкт-Петербургского государственного университета, *с замечаниями*: недостаточно четко представлено сопоставление теоретических результатов автора с экспериментальными данными; не приведено

объяснение более сильного влияния химического состава анионов, чем катионов на электронные характеристики поверхности. 10. **М.Н. Лапушкин**, канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф.Иоффе, г. Санкт-Петербург, *с замечаниями*: мелкие рисунки; автор использует разную терминологию для одной и той же характеристики. 11. **С.А. Безносюк**, д-р физ.-мат. наук, проф., заведующий кафедрой физической и коллоидной химии Алтайского государственного университета, г. Барнаул, *с замечаниями*: отсутствует информация по использованному методу расчета; не дана оценка возможного влияния тепла на предсказанные при абсолютном нуле температур характеристики систем. 12. **А.В. Субашиев**, д-р физ.-мат. наук, проф., лаборатория электротехники и вычислительной техники Университета штата Нью-Йорк, г. Стоуни-Брук, США, *без замечаний*.

В отзывах отмечается, что в диссертации А.В. Бакулина затрагиваются три большие темы в первопринципных исследованиях соединений  $A^{III}B^V$ : 1) стабильность различных реконструкций на полярной поверхности (001); 2) адсорбция галогенов на поверхности в зависимости от химического состава и реконструкции, а также концентрации галогенов; 3) гибридные структуры на основе сплавов Гейслера и соединений  $A^{III}B^V$ , которые актуальны как с научной, так и практической точек зрения. Выполнение исследований связано с проведением трудоемких первопринципных расчетов, которые потребовали от автора изобретательности и высокого качества профессиональной подготовки в анализе полученных результатов. В последней главе рассматривается большое число гипотетических структур, экспериментальное исследование и даже синтез которых могут представлять трудности. В этом смысле наиболее ярко проявляется роль первопринципных расчетов, способных указать и объяснить наиболее перспективные комбинации сплав – полупроводник.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что В.М. Уздин является известным специалистом в области первопринципных расчетов электронной структуры материалов; Р.А. Жачук является квалифицированным специалистом как в области экспериментальных исследований поверхностей полупроводников, так и первопринципных расчетов электронной структуры поверхности; в лаборатории спектроскопии поляризованных электронов

Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого работают квалифицированные специалисты, известные своими достижениями в области физики спин-поляризованных электронов.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

*разработана* теоретическая модель, позволяющая объяснить адсорбат-индуцированное ослабление связей в поверхностных слоях полупроводников  $A^{III}B^V$ , а также количественно оценить данный эффект.

*предложена* модель (4×4) реконструкции для Ga-обогащенной поверхности GaAs(001);

*доказано*, что на границах раздела между полуметаллическими сплавами Гейслера и полупроводниками  $A^{III}B^V$  возможно достижение 100% спиновой поляризации и предсказан атомный состав таких контактов.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

*доказано*, что галогены на катион-обогащенной поверхности (001) соединений  $A^{III}B^V$  предпочитают образовывать химическую связь с элементами третьей группы независимо от реконструкции поверхности, при этом их адсорбция приводит к значительным смещениям катионов и перераспределению зарядовой плотности в поверхностных слоях, что и обуславливает ослабление поверхностных связей данных атомов с подложкой.

*применительно к проблематике диссертации эффективно использован* метод проекционных присоединенных волн в рамках теории функционала электронной плотности для расчета атомной и электронной структуры;

*изложены* результаты исследования энергий образования более 20 реконструкций полярной поверхности  $A^{III}B^V(001)$ , а также влияния галогенов на поверхностную атомную структуру, электронные энергетические спектры, полные и парциальные плотности электронных состояний, орбитальный состав поверхностных состояний ряда реконструкций  $\zeta(4\times 2)$ ,  $\beta 3'(4\times 2)$ ,  $(2\times 4)$  со смешанным димером,  $\beta 2(2\times 4)$  и проведен анализ зарядового переноса, рассчитанного с использованием двух методов, и изменения энергетике связи в ряду рассмотренных галогенов;

*изучена* природа интерфейсных состояний на границе раздела  $A^{III}B^V$  / сплав Гейслера.



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

*разработан* подход для количественного анализа изменений энергетики связи в поверхностных слоях соединений  $A^{III}B^V$  при взаимодействии с адсорбатами;

*определены* структурные и электронные факторы, ответственные за восстановление спиновой поляризации на границе раздела  $A^{III}B^V$  / сплав Гейслера;

*представлены* результаты, которые в перспективе могут быть использованы для совершенствования технологий атомно-слоевого травления, а также быть основой для экспериментального исследования предсказанных интерфейсных структур с высокой спиновой поляризацией для их дальнейшего практического применения в спинтронике.

**Рекомендации об использовании результатов диссертационного исследования.** Полученные результаты могут быть использованы в научных и образовательных учреждениях, в которых ведутся исследования по сходной тематике: Санкт-Петербургском политехническом университете Петра Великого, Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе (г. Москва), Московском государственном университете им. В.М. Ломоносова, Физическом институте им. П.Н. Лебедева РАН (г. Москва), Институте физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН (г. Новосибирск), Институте неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН (г. Новосибирск).

**Оценка достоверности результатов исследования выявила:**

*идея базируется* на квантовомеханической природе межатомного взаимодействия и общепринятой методике расчета атомной и электронной структуры материалов, энергетических характеристик и других свойств низко-размерных структур;

*использовано* сопоставление авторских результатов с полученными ранее результатами по данной тематике.

*установлено* качественное согласие авторских результатов с результатами, представленными в независимых источниках.

**Научная новизна работы** заключается в том, что впервые проведено систематическое изучение влияния галогенов на поверхностную электронную структуру соединений  $A^{III}B^V$ , на основе которого установлены особенности взаимодействия галогенов с полярной поверхностью (001) в зависимости от ее

реконструкции и состава поверхностных слоев. Исследовано влияние концентрации галогенов на реконструкционные превращения на катион-обогащенной поверхности  $A^{III}B^V(001)$  с реконструкцией  $\zeta(4 \times 2)$ . На границах раздела между соединениями  $A^{III}B^V$  и полуметаллическими сплавами Гейслера ( $NiMnSb$ ,  $Co_2CrZ$ ,  $Co_2MnZ$ , где  $Z = Ga, Si, Al$ ) вскрыта природа интерфейсных состояний и установлены структурные и электронные факторы, влияющие на спиновую поляризацию.

**Личный вклад соискателя состоит в:** непосредственном участии в постановке цели и задач исследования, выборе средств достижения цели, формулировке научных положений и выводов, в получении численных результатов исследования, подготовке к публикации научных статей по теме диссертации.

Диссертация соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи по установлению микроскопического механизма адсорбат-индуцированного ослабления межатомных связей в поверхностных слоях соединений  $A^{III}B^V$ , а также определению структурных и электронных факторов, влияющих на величину спиновой поляризации на границе раздела  $A^{III}B^V$  / сплав Гейслера, имеющей значение для развития физики конденсированного состояния.

На заседании 29.10.2015 г. диссертационный совет принял решение присудить **Бакулину А.В.** ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 7 докторов наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 24 человек входящих в состав совета, проголосовал: за – 17, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Заместитель председателя  
диссертационного совета

Ученый секретарь  
диссертационного совета

29.10.2015 г.



Ивонин Иван Варфоломеевич

Киреева Ирина Васильевна