

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Чибисова Андрея Николаевича на тему: «Теоретические исследования влияния дефектов на электронные и структурные свойства кислородсодержащих наноразмерных материалов», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Материалы, содержащие кислород, применяются в различных областях науки и техники. Класс этих соединений достаточно широк по составам и свойствам. Диоксид циркония относится к жаростойким, механически прочным материалам. Диоксид кремния служит изолирующим слоем в электронике, основой защитных слоев, стекол, фильтров, носителем катализаторов и т.д. Диоксид титана применяется в качестве наполнителя красок, пластмасс, бумаги, является эффективным катализатором, поглотителем ультрафиолетового света. Титанат бария обладает высокой диэлектрической проницаемостью, сегнето- и пьезоэлектрическими свойствами. Безусловно, описать закономерности электронного и структурного строения таких разных веществ - непростая задача. В этой связи особое значение приобретают методы квантово-механического моделирования. Особенно, если требуется проанализировать характеристики наноразмерных оксидных систем. Поэтому диссертационная работа Чибисова А.Н., посвященная выявлению закономерностей и теоретическому обоснованию механизмов влияния размера и дефектности на структурные и электронные свойства ультратонких слоев и малых кластеров оксидных high-k материалов с применением метода квантово-механических расчетов, является весьма актуальной.

Важнейшими значимыми результатами работы являются следующие:

- Показано, что в наноразмерных кластерах кислородсодержащих high-k материалов заряды на атомах, расположенных на поверхности кластеров больше по величине, чем заряды на атомах, расположенных в объеме.

- Установлено, что стехиометрические кластеры ZrO_2 , TiO_2 и $BaTiO_3$ проявляют диэлектрические свойства и имеют ширину запрещенной зоны, значение которой зависит от их размера и атомного строения (симметрии). Значение ширины запрещенной зоны ZrO_2 и TiO_2 увеличивается при росте числа атомов в нанокластерах и приближается к ее объемному значению. Однако для $BaTiO_3$ увеличение размера кластера приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны.

- Выявлено, что при внедрении примесных атомов в структуру диэлектрических слоев $Zr, Ti-SiO_2$, $Sr, Zr-BaTiO_3$ и $F-Mg_3Si_4O_{10}(OH)_2$ смещение зон и значение ширины запрещенной зоны определяются ионностью связи металл-кислород (для $Zr, Ti-SiO_2$ и $Sr, Zr-BaTiO_3$) и ионностью связи $Mg-OH$ (для $Mg_3Si_4O_{10}(OH)_2$).

- Показано, что стехиометрические наночастицы титаната бария имеют ромбоэдрическую и моноклинную геометрию, а нестехиометрические наночастицы $BaTiO_3$ с наличием дефицита кислорода образуют кубические и тетрагональные структуры. Большие нанокластеры $BaTiO_3$ представляют собой ядро с тетрагональной структурой и оболочку с кубической структурой.

В ходе выполнения диссертационной работы использованы методы квантово-механических расчетов теории функционала электронной плотности, метод псевдопотенциалов, метод проекционных присоединенных волн, которые хорошо апробированы и дают результаты, удовлетворительно совпадающие с экспериментальными данными. Таким образом, достоверность полученных значений энергетических характеристик исследованных систем не вызывает сомнения.

Исходя из списка опубликованных работ, можно судить о том, что содержание диссертации отражено в оригинальных публикациях в рецензируемых научных журналах с участием соискателя. Результаты диссертации неоднократно доложены и обсуждены на международных и всероссийских конференциях.

Тем не менее, при ознакомлении с материалом, представленным в автореферате, возникают некоторые вопросы:

1. В четвертой главе, в которой приведены результаты моделирования нанослоев диоксида кремния, не объяснено, зачем каждая поверхность покрывалась четырьмя атомами водорода?

2. В той же четвертой главе описана адсорбция молекул CH_4 и NH_3 на поверхности SiO_2 с примесными атомами железа. Чем вызван интерес к данному процессу и данным веществам? Почему рассмотрены адсорбционные свойства поверхности диоксида кремния, легированного только железом, а не цирконием или титаном?

3. При изучении упругих свойств нанокластеров внимание уделено только частицам диоксида циркония, а для других проанализированных в работе наносистем такие исследования не проведены.

В целом диссертационная работа Чибисова А.Н. является законченной, содержит необходимый объем исследований и удовлетворяет требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям согласно п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г., а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Доктор физ.-мат. наук по специальности
01.04.07 – физика конденсированного состояния,
профессор кафедры
«Физика и теоретическая механика»
Федерального государственного
бюджетного образовательного учреждения
высшего образования
«Дальневосточный государственный
университет путей сообщения»



Пячин Сергей Анатольевич

«18» июня 2021 г.

680021, г. Хабаровск, ул. Серышева, д. 47, ФГБОУ ВО «Дальневосточный государственный университет путей сообщения», тел.: (4212) 40-73-12, e-mail: ruachin@mail.ru

Подпись Майорова С.А.
(подпись)
Заведующий М.А. Бессонова
Зам. начальника ОК (подпись) (расшифровка подписи)
«18» 06 2021 г.