

ОТЗЫВ

официального оппонента к.х.н. Арсентьева Максима Юрьевича по диссертационной работе **Прохоренко Анастасии Валерьевны** «Теоретическое исследование влияния примесей фосфора на атомную структуру, электронные и магнитные свойства объемного и двухмерного кремния в системах Si:P», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния

Актуальность. Прогресс в области полупроводниковой индустрии и создания квантовых процессоров неразрывно связан с углублением фундаментальных представлений о процессах, протекающих на микро- и наноуровнях. В качестве предметной области диссертационного исследования автором обоснованно выбраны объёмный кремний и силицен, допированные фосфором Si:P. Традиционный кремний выступает ключевой платформой современной микроэлектроники и исследуется как перспективный материал для формирования твердотельных кубитов. Диссертант исходит из предположения, что направленное легирование фосфором оказывает определяющее влияние на электронную структуру, кристаллическую геометрию и магнитное поведение полупроводниковых систем. На сегодняшний день критически важно выявить фундаментальные закономерности изменения кристаллического строения и распределения электронной плотности состояний в зависимости от пространственной конфигурации внедрённых примесей. Квантово-химический анализ локального упорядочения и поиск стабильных 2D-модификаций кремния позволяют преодолеть расхождения в существующих моделях и компенсировать нехватку сведений в области исследования. Представленные в работе аргументы подтверждают необходимость детального теоретического анализа физических процессов в системах Si:P. Выбор темы исследования обоснован и своевременен.

Цель настоящей работы Прохоренко А.В. заключалась в установлении характера влияния примесей фосфора на атомную структуру, электронные и магнитные свойства объёмного и двухмерного кремния. Для достижения цели автором использованы современные квантово-химические методы исследований и успешно решались задачи по: 1) тестированию псевдопотенциалов кремния простой и гранецентрированной кубических сингоний, а также определению структурных параметров элементарной ячейки силицена; 2) теоретическому поиску и определению новых стабильных модификаций двумерного кремния; 3) исследованию процессов замещения/адсорбции фосфором в объёмных (Si64) и двухмерных (Si32, Si64) кремниевых системах с использованием теории функционала плотности и современных программных пакетов.

В результате проведённого исследования диссертантом достигнуты следующие **положения научной новизны**:

1. В результате представленного исследования Прохоренко А.В. реализован комплексный подход к моделированию систем Si:P на основе теории функционала плотности и метода псевдопотенциалов (ультрамягких и PAW) в базисе плоских волн. Алгоритм тестирования атомных систем и расчёта зонной структуры позволил получить прецизионные данные о плотности электронных состояний.

2. При верификации параметров элементарной ячейки двумерного кремния автором обнаружены новые стабильные низкоразмерные модификации. Соискатель подробно объясняет механизмы структурной перестройки.

3. Внедрение дефектов в структуры силицена и объёмного кремния (Si64) в виде замещения/адсорбции фосфором указывают, что характер распределения и концентрация

примесных атомов фосфора выступают ключевыми факторами, определяющими стабильность, локальную симметрию и магнитный момент результирующей системы.

4. Было установлено, что процессы замещения фосфором в объёмном кремнии и силицине характеризуются выраженной энергетической селективностью в зависимости от геометрии посадочных мест. Расчёты методом упругой ленты (NEB) наглядно продемонстрировали энергетические барьеры и термодинамические условия стабильности фаз. В этих результатах отчётливо прослеживается влияние размерности матрицы (3D против 2D) на характер электронного транспорта и формирование локализованных магнитных моментов вокруг дефекта замещения.

5. Анализ зонной структуры и плотности состояний показал, что легирование фосфором позволяет тонко настраивать ширину запрещённой зоны и индуцировать спиновую поляризацию в полупроводниковых системах. Показано, что функциональные характеристики систем Si: обусловлены не только геометрической релаксацией решётки, но и локальной перестройкой электронных подсистем. Это очень важный вывод, способный предостеречь от упрощённых моделей при проектировании элементов квантовой электроники.

Практическая значимость работы заключается в разработке моделей и получении массивов данных: расчётные методики и теоретические профили электронных состояний могут непосредственно применяться в качестве референтных данных для верификации экспериментальных спектров. Предложенные новые модификации двумерного кремния расширяют элементную базу для перспективной наноэлектроники и спинтроники. Результаты работы могут служить теоретической основой для целенаправленного синтеза материалов с контролируемыми магнитными и проводящими свойствами на базе систем Si:P. Практическая значимость результатов работы Прохоренко А.В. является очевидным свидетельством эффективного использования методов компьютерного материаловедения для решения прикладных задач физики конденсированного состояния.

Положения, выносимые на защиту, отражают суть представленной работы, соответствуют поставленным проблемам, цели и задачам. Основные научные результаты, выносимые на защиту, сформулированы чётко и отражают глубокую проработку использованных квантово-механических моделей.

По материалам диссертационного исследования имеются 1 вопрос, 1 замечание и 2 пожелания:

1. При тестировании исходной структуры чистого силицена получена запрещённая зона порядка 0,8 мэВ. Поскольку эта величина сопоставима с погрешностью численного интегрирования, проводился ли автором анализ чувствительности этого результата и последующего изменения щели к выбору обменно-корреляционных функционалов и плотности сетки k-точек?

2. Для локальных магнитных моментов и особенно для малых разностей энергий между близкими магнитными состояниями искусственное взаимодействие периодических изображений может иметь принципиальное значение. В работе отсутствует оценка влияния увеличения суперъячейки на стабильность магнитных конфигураций.

3. Из текста работы и автореферата не всегда чётко прослеживается, как именно соотносится точность расчётов при использовании ультрамягких псевдопотенциалов и метода проекционных присоединённых волн (PAW) для оценки локальных магнитных моментов. Автору следовало бы дать более развёрнутое сравнительное обоснование выбора конкретного типа псевдопотенциала для систем с различной концентрацией примеси фосфора.

4. При описании новых модификаций двумерного кремния, обнаруженных с помощью эволюционного алгоритма в программе Calypso, автору стоило бы привести оценку их

динамической стабильности (например, расчёт фононных спектров), чтобы подтвердить возможность их экспериментального метастабильного существования при комнатных температурах.

Отмеченные недостатки носят преимущественно рекомендательный характер, не затрагивают основных защищаемых положений и не снижают общую научную ценность диссертационной работы.

Результаты диссертационной работы Прохоренко А.В., полученные научные положения и выводы являются **достоверными**, обоснованными и не противоречат существующим научным представлениям в физике конденсированного состояния, при этом существенно дополняют их. Методология и методы диссертационного исследования достаточно традиционны и современны. **Достоверность** полученных данных обеспечена применением строгих квантово-химических методов, базирующихся на фундаментальных законах квантовой механики и теории функционала плотности. Использование корректно протестированных ультрамягких и PAW-псевдопотенциалов в рамках апробированных программных комплексов Quantum Espresso и VASP позволило соискателю обеспечить высокую точность численных расчётов зонной структуры и плотности электронных состояний. Обоснованность выводов подтверждается внутренней согласованностью результатов, а также точным совпадением с имеющимися независимыми экспериментальными данными для кремниевых систем. Результаты работы прошли всестороннюю экспертизу при публикации в ведущих рецензируемых научных журналах и получили одобрение профессионального сообщества на профильных всероссийских и международных конференциях.

Апробация работы и публикации. Материалы диссертационной работы Прохоренко А.В. были представлены на Международной конференции «Quantum 2020» (Китай, 2020 г.); II-VI Международных конференциях «Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов» (г. Москва, 2020-2024 гг.); XVIII, XXI Региональных и XX Всероссийской конференциях «Физика: фундаментальные и прикладные исследования, образование» (г. Хабаровск, 2020 и 2024 гг., г. Благовещенск, 2023 г.); VI и VII Международных конференциях «International Conference Information Technologies and High-Performance Computing» (г. Хабаровск, 2021 г., 2023 г.); Международной школе-конференции «Sixth Asian School-Conference on Physics and Technology of Nanostructured Materials» (г. Владивосток, 2022 г.); семинаре «Синтез, характеристика и моделирование мультисистемных наноматериалов» Юго-Западного государственного университета (г. Курск, 2024 г.); Российско-Китайском симпозиуме «International Symposium Materials and Technologies» (г. Хабаровск, 2024 г.), а также заняты призовые места в XXIV Краевом конкурсе молодых учёных и аспирантов (г. Хабаровск, 2021 г. (III место)), XXVI Краевом конкурсе молодых учёных (г. Хабаровск, 2023 г. (благодарственное письмо)) и XXVII Краевом конкурсе молодых учёных (г. Хабаровск, 2024 г. (III место)). Основное содержание работы изложено в 13 публикациях, из которых 3 статьи входят в международные базы научного цитирования Web of Science и Scopus.

Представленная работа выполнена на высоком научно-теоретическом уровне и является завершённым самостоятельным исследованием с чётко сформулированной целью, достоверной методологией и обоснованными выводами. Учитывая высокую актуальность темы, научную новизну и практическую значимость полученных результатов, а также надлежащую степень их достоверности и широкую апробацию на научных конференциях и в рецензируемой печати, диссертационное исследование Прохоренко Анастасии Валерьевны полностью удовлетворяет критериям, установленным п.9 Положения о присуждении учёных степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Работа строго соответствует паспорту специальности 1.3.8 - физика конденсированного состояния (физико-математические науки) и является законченным научно-квалификационным исследованием. На основании вышеизложенного считаю, что её автор,

Прохоренко Анастасия Валерьевна, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 - физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:

Арсентьев Максим Юрьевич,

кандидат химических наук (02.00.04 – физическая химия),

Филиал федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» — Институт химии силикатов им. И.В. Гребенщикова, 199034, Россия, г. Санкт-Петербург, Макарова наб., д. 2, тел. +7(950)048-6050, e-mail: ars21031960@gmail.com,
старший научный сотрудник

 М.Ю. Арсентьев

Подпись Арсентьева М.Ю. «ЗАВЕРЯЮ»

И.о. директора

кандидат химических наук

Филиал федерального государственного
бюджетного учреждения «Петербургский
институт ядерной физики им. Б.П.
Константинова

Национального
исследовательского центра «Курчатовский
институт» — Институт химии силикатов им.
И.В. Гребенщикова, 199034, Россия, г. Санкт-
Петербург, Макарова наб., д. 2,
<https://www.iscras.ru/>

тел. 8(812)328-07-02, e-mail: ichs@pnpi.nrcki.ru

