

**Отзыв официального оппонента д.ф.-м.н. Прудникова Павла Владимировича по
диссертационной работе Прохоренко Анастасии Валерьевны
«Теоретическое исследование влияния примесей фосфора на атомную структуру,
электронные и магнитные свойства объемного и двумерного кремния в системах Si:P»,
представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по
специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния**

На данный момент идет существенная конкуренция в сфере платформ для квантовых вычислений. Кремниевая платформа для квантовых вычислений характеризуется рекордным fidelity, но требует атомарной точности, которой сложно достичь в эксперименте без глубокого понимания динамики дефектов и межатомного взаимодействия примесей. Ситуация усложняется при попытке перенести эти подходы в низкоразмерные структуры - в частности, в двумерный кремний. Метастабильность сотовой решётки силицена, сильная пространственная анизотропия и изменение координационного окружения кардинально меняют физическое поведение донорных примесей фосфора по сравнению с объёмным кристаллом. Поскольку эффекты спиновой поляризации, механизмы структурной релаксации и специфика зарядового трансфера в таких системах не поддаются описанию с помощью классических полуаналитических моделей, первопринципные квантово-механические расчёты становятся ключевым инструментом для прогнозирования их свойств. В диссертации проведен расчёт кинетических барьеров и путей миграции атомов фосфора при адсорбции на поверхности силицена, что позволяет связать термодинамическую выгодность предсказанных квантовых состояний с возможностью их физической реализации в технологических процессах. Таким образом, **актуальность тематики исследований**, проводимых в диссертации сомнений не вызывает.

Научная новизна диссертационной работы определяется комплексным квантово-механическим подходом к исследованию электронных и магнитных степеней свободы в системах Si:P на основе теории функционала плотности в приближении неколлинеарной намагниченности с учётом спин-орбитального взаимодействия. К числу наиболее существенных и оригинальных результатов, полученных лично автором, относятся следующие положения:

1. Установлено, что введение замещающей примеси фосфора в сотовую решётку силицена индуцирует появление локального магнитного момента, величина которого качественно превосходит аналогичное значение для объёмного кремния, и приводит к расширению запрещённой зоны со снятием вырождения энергетических уровней.
2. Проведён детальный анализ энергетической зависимости стабильности двумерной системы от взаимной пространственной ориентации локальных магнитных моментов пары атомов фосфора в плоскости силицена. Доказано, что в области слабого взаимодействия основным

является триплетное состояние дефектов, которое по мере усиления магнитного взаимодействия уступает место стабильной синглетной конфигурации.

3. С использованием метода управляемой эластичной ленты (NEB) впервые рассчитаны активационные барьеры путей миграции адсорбированных атомов фосфора по поверхности силицена. Показано, что геометрия с оппозиционным расположением атомов в противоположных подслоях характеризуется наименьшими энергетическими барьерами, что указывает на повышенную мобильность примеси в таких конфигурациях.

Особое научное значение имеет то, что в работе последовательно осуществлён переход от статического описания равновесных конфигураций к анализу динамических переходов.

Практическая значимость заключается в получении массива фундаментальных данных, который может использоваться при моделировании, проектировании и целенаправленном синтезе кремниевых наноструктур с контролируемыми электронными и спиновыми характеристиками. Рассчитанные в диссертации энергетические профили, геометрические параметры решётки, величины локальных магнитных моментов и карты распределения электронной плотности служат теоретической базой для интерпретации данных физических экспериментов.

Положения, выносимые на защиту, полностью соответствуют поставленной цели, отражают основное содержание проведённого исследования и содержат чётко аргументированные физические утверждения. В защищаемых тезисах соискатель последовательно раскрывает природу возникновения локальных магнитных моментов в легированном монослое силицена, термодинамическую устойчивость триплетных и синглетных конфигураций донорных пар, а также механизмы асимметричного переноса заряда и кинетические закономерности поверхностной диффузии атомов фосфора в гофрированной решётке.

Все положения логически увязаны между собой и вытекают из результатов выполненных вычислений. Автор акцентирует внимание на ключевых оригинальных результатах, имеющих фундаментальное значение для понимания физики дефектов в низкоразмерных полупроводниковых системах. Содержание положений показывает, что диссертант глубоко владеет предметом исследования и чётко выделяет свои главные научные достижения.

По работе имеются следующие замечания:

1. Результаты третьей главы диссертации относительно компенсации локальных магнитных моментов были получены для неколлинеарных расчетов? Проводилось ли сравнение сделанных выводов с результатами коллинеарных схем расчета намагниченности?
2. Во второй главе диссертации проводились исследования зависимости значений полной энергии от числа k -точек и было установлено, что значения хорошо сходятся при числе точек больше 12. В следующих главах «для ускорения расчетов» применялся меньший набор k -точек. Как это влияло на устойчивость и точность результатов?

3. В четвертой главе сопоставляются энергии конечных конфигураций адсорбции и замещения. Какие существуют условия реализации этих конфигураций и как на это влияют условия экспериментального получения образца, например STM-литографии?

4. В работе рассматривались двумерные структуры силицена в вакууме. Рассматривалось ли в работе или планируется учет влияния среды, адсорбированных других атомов, например водорода, или влияние точечных дефектов, например кристаллических искажений?

5. В работе рассматривается концентрация фосфора, равная 3,125 ат.%, что существенно выше реальных концентраций одиночных доноров в объёмном кремнии. Хотелось уточнить устойчивость предсказанных результатов при увеличении суперячейки?

6. Практическая значимость результатов сформулирована преимущественно применительно к долгосрочным перспективам квантовых вычислений. Рекомендуется конкретизировать, какие именно рассчитанные параметры (барьеры, энергии, геометрия) могут сравнимы с результатами расчетов непосредственных квантовых вычислений, а также могут использоваться при проектировании технологической платформы.

Указанные замечания не влияют на общую положительную оценку диссертационной работы, а скорее демонстрируют интерес оппонента к проведенным исследованиям.

Достоверность и обоснованность научных результатов, полученных в диссертационном исследовании А.В. Прохоренко, обеспечиваются применением строгих первопринципных подходов теории функционала плотности, ставших международным стандартом в *ab initio* расчётах многоатомных систем. Вычисления выполнены на высоком методическом уровне с использованием широко апробированных в мировом научном сообществе программных пакетов Quantum ESPRESSO и VASP. Достоверность численных данных подтверждается обязательным проведением предварительного тестирования расчётных схем, оптимизацией параметров базиса плоских волн и плотности сеток дискретизации k -пространства. Выводы диссертации подкрепляются внутренней согласованностью результатов и их соответствием известным экспериментальным и теоретическим литературным данным по кремнию. **Апробация работы** и полнота опубликования результатов диссертационного исследования А.В. Прохоренко полностью соответствуют установленным нормативным требованиям. Основные результаты и выводы исследования прошли обсуждение на научных конференциях, специализирующихся на физике конденсированного состояния и квантовых технологиях. Всего по теме исследования опубликовано 13 научных работ, включая 3 статьи в рецензируемых журналах из перечня ВАК, индексируемых в международных базах данных Scopus и Web of Science. Результаты были опубликованы в таких рейтинговых научных журналах как «FlatChem», «RSC Advances».

Диссертационная работа представляет собой законченное, самостоятельно выполненное теоретическое научно-квалификационное исследование. По своему содержанию, уровню проработки, актуальности, научной новизне, объёму выполненных исследований и практической значимости диссертационная работа полностью соответствует всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата наук, в том числе критериям, установленным пунктом 9 «Положения о присуждении учёных степеней». Работа строго соответствует паспорту специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния (физико-математические науки). Её автор, Прохоренко Анастасия Валерьевна, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент

доктор физико-математических наук,

специальность 01.04.07 - физика конденсированного состояния, профессор,

главный научный сотрудник отдела материаловедения и

физико-химических методов исследования,

Центр новых химических технологий ИК СО РАН

Прудников Павел Владимирович

Дата: 17 сентября 2026 г.

Адрес служебный: 644040, Российская Федерация, г. Омск, ул. Нефтезаводская, 54, Центр новых химических технологий Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук» (Омский филиал), тел. +7(381-2) 67-04-50, e-mail: prudnikp@ihcp.ru

Подпись д.ф.-м.н., гл. науч. сотр. Центра новых химических технологий ИК СО РАН Прудникова Павла Владимировича удостоверяю.

Ученый секретарь Центра новых
химических технологий ИК СО РАН
кандидат химических наук



Сырьева Анна Викторовна