ОТЗЫВ

на автореферат кандидатской диссертации 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.

Диссертация Прохоренко А.В. направлена на установление связи между пространственным положением примесных кубитов фосфора и стабильностью получаемых полупроводниковых фаз. Миниатюризация элементов наноэлектроники требует понимания того, как одиночные дефекты влияют на электронные свойства кристаллической системы. Автор решает эту задачу с помощью ab initio расчётов, сопоставляя трёхмерные структуры и монослои силицена.

Основная новизна результатов заключается в детальном расчёте энергетических параметров легированных систем. Ценным научным результатом является нахождение энтальпии образования и энергии когезии для предсказанных двумерных аллотропов кремния (в частности, для структуры группы Pmma). В работе показано, что поверхностная адсорбция атомов фосфора энергетически выгоднее их замещения в кристаллической решётке, и определено наиболее стабильное положение примеси в верхнем атомном слое (позиция Hill). При исследовании парного легирования соискателем установлено, что наиболее устойчивой является оппозитная конфигурация двух адсорбированных атомов фосфора, расположенных друг напротив друга в противоположных атомных подслоях. Кроме того, автору удалось рассчитать минимальные энергетические пути и активационные барьеры миграции атомов фосфора, что важно для оценки кинетической устойчивости систем дефектов.

Из текста автореферата следует, что поставленные в работе задачи полностью решены. Вычислительный алгоритм протестирован на модельных суперъячейках кремния с разной концентрацией доноров. Достоверность численных данных не вызывает сомнений, так как моделирование выполнено в рамках стандартного метода функционала плотности с контролем сходимости по основным вычислительным параметрам. Материалы диссертации прошли достаточную апробацию на конференциях и опубликованы в рецензируемых журналах.

Диссертационное исследование Прохоренко Анастасии Валерьевны является законченным теоретическим трудом высокого уровня. Полученные результаты вносят вклад в физику конденсированного состояния. Работа удовлетворяет всем требованиям ВАК, а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Кандидат физико-математических наук, (01.04.16 – физика атомного ядра и элементарных частиц)
Доцент по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния
Доцент, кафедра физики и технической механики
ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (РТУ МИРЭА)
Дата 23.09.2026 _____ Сафронов Александр Аркадьевич
Согласен на обработку персональных данных

119454, г. Москва, пр-кт. Вернадского, д.78
Тел.: 8(917)-550-06-47
E-mail.: safronov@mirea.ru

Подпись руки _____

УДОСТОВЕРЯЮ:
Начальник отдела
Управления кадров _____ В.В. Козикова

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский технологический университет» (РТУ МИРЭА) ОГРН 1037739275740 УПРАВЛЕНИЕ КАДРОВ МОСКВА