

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Глушкова Владимира Леонидовича
«Расчет поверхностных характеристик металлов
методом функционалов плотности»,
представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
01.04.07 – Физика конденсированного состояния

В диссертационном исследовании В.Л. Глушкова решены важные и актуальные научные задачи современной физики конденсированного состояния. Основной целью работы является установление вида распределения электронной плотности у поверхности металла в рамках метода функционалов плотности. Влияние энергетического состояния поверхности существенно при рассмотрении процессов обработки металлов, процессов спекания и смачивания, радиационном образовании дефектов при процессах ионно-плазменного напыления покрытий и т.д. Большое количество эффектов, используемых в современной полупроводниковой микроэлектронике, связано с явлениями, происходящими на границе поверхности и в межфазной области раздела контактирующих твердых тел. Работа В.Л. Глушкова является весьма актуальной, поскольку в ней рассматривается электронная структура поверхности металла, осуществляется расчет электронной плотности и ряда наблюдаемых характеристик металлов. Результаты, полученные в работе В.Л. Глушкова, могут быть использованы для решения прикладных задач микро- и наноэлектроники.

В диссертации В.Л. Глушкова получен ряд новых значимых научных результатов. Особый интерес представляет исследование влияния градиентных поправок высокого порядка в функционал поверхностной энергии системы. Показано, что для пробной функции распределения электронной плотности, учитывающей осцилляции Фриделя, вклад градиентных поправок в кинетические и обменно-корреляционные составляющие функционала поверхностной энергии является существенным для металлов с высокой электронной плотностью. Установлена зависимость параметров поверхности от ориентации кристаллографических плоскостей, поверхностная энергия тем больше, чем менее плотноупакованной является поверхностная грань. Получены значения кинетического, электростатического, обменного и корреляционного вклада в величину поверхностной энергии для функции распределения плотности, учитывающей электронные осцилляции на границе раздела «металл-вакуум». Для функции распределения, включающей осцилляции Фриделя, рассчитаны работа выхода электрона с поверхности, поверхностная энергия и высота потенциального барьера ряда металлов, а также вклад дискретности ионного остова в перечисленные характеристики поверхности.

Достоверность полученных результатов не вызывает сомнений. В работе использовались известные и надежные методы расчета наблюдаемых параметров

изучаемых систем. Результаты диссертационного исследования в достаточной мере согласуются с имеющимися в литературе экспериментальными данными для соответствующих величин. По материалам диссертации опубликованы 11 работ, 4 из которых - в журналах, включенных в список ВАК РФ. Все вошедшие в диссертационную работу результаты были представлены на всероссийских и международных конференциях.

В качестве замечания следует отметить, что в настоящем исследовании не был рассмотрен вопрос о построении вида функционала, определяющего поверхностную энергию основного состояния электронного газа у поверхности металла.

Данное замечание не снижает научно-практическую ценность работы. Судя по автореферату, диссертационная работа по своей актуальности, научной новизне и практической ценности соответствует требованиям, предъявляемым ВАК России к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор - Глушков Владимир Леонидович - заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — «Физика конденсированного состояния».

Даю согласие на обработку моих персональных данных.

Манько Ольга Владимировна

доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник

Сектора теоретической радиофизики, Отделения квантовой радиофизики им. Н.Г. Басова, Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук

Почтовый адрес: 119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д.53

Тел. 8(499)135-42-64

E-mail: omanko@sci.lebedev.ru

_____ О.В. Манько

Подпись ведущего научного сотрудника, д.ф.-м.н. О.В. Манько заверяю:

Заместитель директора Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук по научной работе

д.ф.-м.н.

4 12 18

Савинов Сергей Юрьевич