

ОТЗЫВ

официального оппонента, к.ф.-м.н., заведующего учебно-научной лабораторией теоретической и прикладной нанотехнологии ГОУ ВО МО «Московский государственный областной университет»

Чаусова Дениса Николаевича,

на диссертационную работу Глушкова Владимира Леонидовича

«Расчет поверхностных характеристик металлов

методом функционалов плотности»,

представленную на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Актуальность рецензируемой диссертационной работы определяется большой значимостью поверхностных исследований, и особенно, технологий обработки металлов. Производство композиционных материалов, процессы ионно-плазменного напыления, образование дефектов на поверхности, коррозия, гетерогенный катализ, процессы спекания и смачивания в порошковой металлургии определяются энергетическим состоянием поверхности. Большое количество эффектов, применяемых в современной микроэлектронике, основано на явлениях, происходящих в поверхностном слое и межфазной области раздела контактирующих твердых тел.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка публикаций по теме диссертационного исследования и списка литературы. Общий объем составляет 122 страницы, включая 45 рисунков, 17 таблиц и список литературы из 127 наименований.

Во введении представлена общая характеристика диссертационной работы, обоснована актуальность темы, выделены основные положения, составляющие ее научную новизну; сформулированы практическая значимость работы, ее цели и задачи, основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена описанию теоретических подходов при расчетах в многоэлектронных системах, основанных на использовании

электронной плотности. Основное внимание уделено представлению энергии основного состояния системы взаимодействующих частиц в заданном внешнем поле как однозначного функционала, зависящего только от плотности числа частиц. Рассмотрены наиболее распространенные методы расчета электронной структуры металлической поверхности.

Во **второй главе** используется метод пробных функций для расчета поверхностной энергии металлов в рамках модели однородного фона. Обоснован выбор метода исследования и приведено его подробное описание, а также основные преимущества при вычислении характеристик поверхности. Методами теории функционалов плотности произведен расчет разных типов пробных функций распределения электронной плотности. Полученные распределения электронной плотности, используются для определения работы выхода электрона с поверхности, высоты эффективного потенциального и дипольного барьера. Проведенное сравнение результатов аналитических вычислений с имеющимися в литературе экспериментальными данными и численными расчетами соответствующих величин, позволяет выбрать оптимальную из предложенных функцию распределения электронной плотности и рассчитать соответствующие ей характеристики поверхности.

В **третьей главе** автор произвел расчет поверхностной энергии и работы выхода металлов в рамках метода функционалов плотности с учетом градиентных поправок на неоднородность электронного газа в приповерхностной области для кинетической и обменно-корреляционной энергий. В работе рассмотрено влияние дискретности в распределении ионов по узлам кристаллической решетки, которое приводит к дополнительным вкладам в электростатическую энергию взаимодействия как за счет ион-ионного, так и ион-электронного взаимодействий. Полученные в данной главе характеристики поверхности хорошо согласуются с известными экспериментальными результатами и могут быть использованы в создании

тонкопленочных структур в микроэлектронике, совершенствовании технологических методов управления свойствами поверхности деталей узлов трения с целью повышения их работоспособности, износостойкости и долговечности.

В **заключении** сформулированы основные результаты и выводы, выносимые на защиту.

Полученные диссертантом результаты и их трактовка имеют существенную **научную новизну**, теоретическую и практическую ценность. В частности, особый интерес представляют новые научные результаты:

— в рамках модели однородного фона получены кинетический, электростатический обменный и корреляционный вклады в поверхностную энергию системы;

— методами теории функционала плотности произведен расчет электронной плотности пробной функции распределения, учитывающей осцилляции Фриделя, для ряда щелочных и переходных металлов;

— установлено, что вклад дискретности ионного остова и ориентация кристаллографической плоскости оказывает существенное влияние на значения поверхностных характеристик для выбранной пробной функции распределения;

— установлено, что градиентные поправки высокого порядка позволяют улучшить согласие теоретически рассчитанных и экспериментальных данных для переходных металлов.

В ходе выполнения диссертационной работы ее результаты были опубликованы и доложены на четырех Всероссийских и Международных конференциях. Основные **научные положения** достаточно **обоснованы** в тексте диссертации. Они не противоречат существующим представлениям и литературным данным. Это позволяет заключить, что **результаты являются достоверными**.

Поставленные в работе задачи исследования решены, заявленная цель достигнута; при этом выводы соответствуют поставленной цели и решаемым задачам.

Опубликованные результаты и автореферат полностью отражают содержание диссертационной работы.

По диссертации Глушкова Владимира Леонидовича необходимо сделать следующие **замечания**:

1. В Таблице 5 приведены значения рассчитанной поверхностной энергии для ряда щелочных металлов, но не приводятся значения поверхностной энергии металлов с более высокой электронной плотностью.
2. За пределами внимания диссертанта осталось исследование эффекта решеточной релаксации металлических поверхностей.
3. Требуется дополнительное пояснение тот факт, что согласно результатам расчетов поверхностной энергии в модели однородного фона, пробные функции распределения без осцилляций электронной плотности у границы раздела «металл-вакуум» дают более хорошее согласие с экспериментальными результатами.

Отмеченные в настоящем отзыве недостатки не снижают научной ценности выполненной диссертантом работы. Сделанные замечания носят рекомендательный характер.

Диссертация Глушкова В.Л. «Расчет поверхностных характеристик металлов методом функционалов плотности» выполнена на высоком научном уровне и является завершенным научно-квалификационным исследованием, развивающим актуальное научное направление. Проведенные исследования и полученные в диссертационной работе результаты в полной мере отвечают требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденным постановлением

Правительства Российской Федерации №842 от 24.09.2013 г., предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — «Физика конденсированного состояния», а ее автор Глушков В.Л. заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук.

Как официальный оппонент диссертационной работы я, Чаусов Денис Николаевич согласен на обработку моих персональных данных.

Официальный оппонент

Заведующий научно-учебной лабораторией
теоретической и прикладной нанотехнологии
ГОУ ВО МО «Московский государственный
областной университет»,
кандидат физико-математических наук
по специальности 01.04.07 — «Физика
конденсированного состояния»

_____ Чаусов Денис Николаевич

105005, г. Москва, ул. Радио, д. 10А

Телефон: (495) 780-09-43, доб. 1342

E-mail: office@mgou.ru

Подпись Чаусова Д.Н. удостоверяю:
Начальник отдела кадров сотрудников
и преподавателей

21.11.18

/О.В. Лобачева/