



МИНОБРНАУКИ РОССИИ
федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Санкт-Петербургский политехнический
университет Петра Великого»
(ФГАОУ ВО «СПбПУ»)

№ _____
на № _____ от _____

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе
ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский

политехнический университет Петра Великого»

д.т.н. В.В. Сергеев

г. Санкт-Петербург

«08» ноября 2018 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» на диссертацию **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 работы. Диссертация Глушкова В.Л. посвящена решению одной из фундаментальных задач физики конденсированного состояния — исследованию электронной структуры поверхности металлов. Необходимость такого рода исследований связана с потребностью современного производства в результатах теоретических оценок параметров электронного газа, необходимых для создания тонкопленочных структур в микроэлектронике, совершенствования методов обработки и управления свойствами поверхности деталей, разработки методов приготовления чистых поверхностей и границ раздела, применения экспериментальных и теоретических методов физики чистых поверхностей для изучения процессов атомной адсорбции и десорбции. Разработка общих фундаментальных представлений о кристаллической и электронной структуре чистой поверхности, представленная в работе В.Л. Глушкова, позволяет использовать результаты проведенного им исследования при описании свойств поверхности металла в виде удобных для дальнейшего применения аналитических соотношений, связывающих между собой наблюдаемые характеристики приповерхностного электронного газа. Полученные в работе расчетные значения характеристик поверхности металла, таких как работа выхода

электрона, позволяют определять чистоту поверхности. Разработка методов определения электронной структуры поверхностей является важной задачей, без решения которой невозможен дальнейший прогресс во многих технологических приложениях, в связи чем тема диссертации В.Л. Глушкова является *актуальной*.

Структура и содержание диссертации. Работа состоит из введения, 3 глав и заключения. Общий объем составляет: 122 страницы, включая 45 рисунков, 17 таблиц и список литературы из 127 наименований.

Во введении представлена общая характеристика работы, обоснована актуальность темы диссертационного исследования, сформулированы цели и задачи, выделены положения, выносимые на защиту, приведены сведения об апробации полученных результатов.

В первой главе представлен обзор теоретических методов решения многоэлектронной задачи, которые были развиты в рамках теории функционала плотности. В частности, в главе рассмотрены способы описания электронного газа в приповерхностной области на границе раздела «металл-вакуум».

Вторая глава посвящена изучению электронной структуры металлической поверхности методом функционала плотности с использованием пробных функций электронной плотности. Проводится расчет характеристик поверхности щелочных металлов в модели однородного фона. Особое внимание уделено получению функции распределения, учитывающей колебания электронной плотности из решения самосогласованных уравнений. Получен кинетический, электростатический и обменно-корреляционный вклад в функционал поверхностной энергии металлов.

В третьей главе изучено влияние дискретности кристаллической решетки и ориентации кристаллографических плоскостей на распределение электронной плотности и характеристики металлической поверхности. Рассмотрено влияние градиентных поправок для обменно-корреляционной и кинетической энергий на функционал поверхностной энергии металлов. Автором показано, что вклад градиентных поправок во втором порядке разложения по электронной плотности является достаточным для описания характеристик поверхности в металлах с невысокой электронной плотностью, в то же время для металлов с высокой электронной плотностью необходимо учитывать градиентные поправки более высокого порядка.

В заключении сформулированы основные результаты работы и выводы.

Научная новизна работы обоснована и не вызывает сомнений. Автором впервые получены важные научные результаты, среди которых необходимо отметить следующие:

- найдено аналитическое выражение для распределения электронной плотности у поверхности металла, учитывающее осцилляции электронной плотности в модели однородного фона, при учете взаимодействия с кристаллической решеткой;
- получены характеристики поверхности металла, такие как поверхностная энергия, работа выхода электрона, высота эффективного потенциального барьера для функции распределения электронной плотности, учитывающие осцилляции Фриделя;
- найден вклад в поверхностную энергию и работу выхода электрона с поверхности от взаимодействия электронного газа с ионами кристаллической решетки в модели, учитывающей осцилляции электронной плотности; проведен анализ зависимости поверхностных характеристик от ориентации кристаллографической плоскости;
- рассчитаны значения характеристик поверхности с учетом градиентных поправок в функционал поверхностной энергии системы, установлена целесообразность применения градиентных поправок высокого порядка для металлов с различным значением электронной плотности.

Степень достоверности и значимости результатов для науки и практики.

Результаты работы и выводы, сделанные на их основе, гарантируются надежностью применявшихся методов исследования, согласием с теоретическими и экспериментальными результатами, полученными другими авторами. Развитые в диссертационной работе методы могут быть использованы при изучении процессов и явлений, проходящих на поверхности металлов. Представленные в настоящем диссертационном исследовании методы расчета поверхностных характеристик имеют фундаментальный характер и могут быть использованы при создании поверхности металла с заданными характеристиками, необходимыми для разработки новой элементной базы наноразмерных электронных устройств. Предложенный в работе аналитический вид распределения электронной плотности, включающий осцилляции Фриделя, позволяет получить меньшее расхождение теоретически рассчитанных характеристик поверхности и их экспериментальных значений. Полученные характеристики поверхности дополняют методы экспериментального анализа и

диагностики поверхности, основанные на ионной и электронной спектроскопии. Также результаты диссертации могут быть использованы при исследовании взаимодействия излучения с веществом.

Замечания по диссертации

В качестве замечаний и пожеланий следует отметить следующее:

- автором учитывается дискретность кристаллической решетки только в рамках одномерной модели, но не обсуждается вклад пространственной дискретной структуры кристалла;
- за пределами внимания диссертанта осталось изучение зависимости расчетных характеристик электронного газа от температуры системы, представляющее интерес для дальнейшего использования полученных результатов в расчетах термических и термоэлектрических свойств описываемой системы;
- в 3-ей главе п. 3.5 рассматривался только один из возможных видов градиентных вкладов в функционал обменно-корреляционной энергии; желательно было бы произвести расчет характеристик поверхности для других видов градиентных вкладов и сравнить полученные результаты;
- диссертанту следовало бы более последовательно структурировать текст, в частности, выделить в отдельную главу рассмотрение учета градиентных поправок в функционале поверхностной энергии системы.

Отмеченные недостатки носят частный характер и не снижают значимость и достоверность полученных автором результатов, не влияют на надежность и обоснованность выводов диссертации.

Общее заключение. Диссертация Глушкова Владимира Леонидовича «Расчет поверхностных характеристик металлов методом функционалов плотности» является законченной научно-квалификационной работой выполненной на высоком уровне, в которой на основе проведенных автором исследований изложены новые научно обоснованные сведения о электронной структуре и методах расчета поверхностных свойств металлов в рамках метода функционала плотности с учетом взаимодействия с ионной решеткой и поправками на неоднородность электронного газа в приповерхностной области.

Все основные результаты работы опубликованы в четырех научных изданиях из Перечня ВАК и докладывались на международных и всероссийских конференциях.

Автореферат диссертации и опубликованные работы полностью отражают ее содержание.

По актуальности, научной и практической значимости полученных результатов, новизне диссертация соответствует требованиям Положения о присуждении ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 г. (ред. от 02.08.2016 г.), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор, Глушков Владимир Леонидович, заслуживает присуждения искомой ученой степени по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния.

Отзыв на диссертацию обсужден и одобрен на заседании кафедры экспериментальной физики ФГАОУ ВО СПбПУ «07» ноября 2018 г., протокол № 3.

Почтовый адрес: 195251, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29.

Телефон: +7 (800) 707-18-99.

Адрес электронной почты: office@spbstu.ru.

Заведующий кафедрой экспериментальной физики СПбГПУ,
доктор физико-математических наук, профессор
Е.Г. Апушкинский

Директор института физики, нанотехнологий и телекоммуникаций,
доктор технических наук, профессор
С.Б. Макаров

07.11.2018