

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на диссертационную работу Высотина Максима Александровича «Моделирование структуры и свойств соединений кремния с железом, марганцем и литием», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 «Физика конденсированного состояния»

Диссертационная работа Высотина М.А. посвящена актуальной теме – изучению механизмов взаимодействия атомов металлов с кремнием и соответствующих свойств силицидов, образующихся на поверхности Si(001). Кремний и силициды переходных металлов представляют значительный интерес для нанотехнологий благодаря своим термоэлектрическим, оптическим и электронным свойствам. В качестве объектов исследования были выбраны тонкие плёнки различных фаз дисилицида железа FeSi_2 , высших силицидов марганца, а также сплавов кремний-литий, синтез которых осуществляется на подложках из кремния.

В ходе работы был получен ряд оригинальных результатов в области физики конденсированного состояния, имеющих большую теоретическую и практическую значимость, в частности изучено влияния точечных дефектов, границ раздела фаз и свободных поверхностей на процессы формирования и свойства тонкоплёночных силицидов железа, марганца и сплавов литий-кремний, растущих на кремниевых подложках. В ходе работы были выполнены расчеты кристаллической и электронной структуры новой фазы высших силицидов марганца $\text{Mn}_{17}\text{Si}_{30}$ и показана возможность смены знака основных носителей в присутствии вакансий по кремнию. Был предложен метод поиска межфазных границ, образующихся при эпитаксиальном росте, хорошо объясняющий различия в качестве экспериментально получаемых тонких пленок FeSi_2 на разных подложках. Была рассчитана температурная зависимость величины механического напряжения интерфейса силицид/кремний, и на ее основе объяснена смена эпитаксиальной фазы FeSi_2 , растущей на поверхности Si(001) при изменении температуры синтеза. Была предложена модель огранки кристаллита фазы $\alpha\text{-FeSi}_2$ при росте на Si(001) и показана возможность смены кристаллографической ориентации пленки вследствие изменения поверхностной энергии. С помощью оригинального подхода с использованием генетического

алгоритма оптимизации был параметризован новый межатомный потенциала Si-Li и с его помощью описан механизм послойного проникновения лития через поверхность Si(001) с сохранением четкой межфазной границы.

Результаты проведенных теоретических расчетов находятся в согласии с имеющимися экспериментальными данными, что подтверждает адекватность применяемых методов и подходов. Основные результаты работы обсуждались на множестве конференций международного уровня и опубликованы в ведущих рецензируемых журналах; всего по материалам диссертации выпущено 6 печатных работ в изданиях, рекомендованных ВАК, из которых 5 – в изданиях индексируемых в Web of Science и Scopus.

Представленные в диссертационной работе результаты по моделированию структур и расчету свойств были получены Высотиным М.А. лично. В своей научно-исследовательской работе он проявил себя целеустремленным и грамотным специалистом, способным к самостоятельной постановке и решению задач, освоению новых теоретических методов, разработке собственных вычислительных программ, обработке и глубокому анализу результатов.

На основании вышесказанного считаю, что работа «Моделирование структуры и свойств соединений кремния с железом, марганцем и литием» полностью соответствует требованиям ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а её автор Высотин М.А. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 «Физика конденсированного состояния».

Научный руководитель:

Ведущий научный сотрудник
Лаборатории ФМЯ, ИФ СО РАН
доктор физико-математических наук,


(подпись)

Федоров
Александр Семенович

30 сентября 2021 г.

Подпись	Федоров А. С.	заверяю
Ученый секретарь	с. ф.-ч. ч.	
Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН (ИФ СО РАН)		
«	20	г.

 А. О. Высотин