

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.228.01, СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО НАУЧНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ «ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КРАСНОЯРСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК» (ФИЦ КНЦ СО РАН, КНЦ СО РАН), ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 17.12.2021 г. № 14
о присуждении Высотину Максиму Александровичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Моделирование структуры и свойств соединений кремния с железом, марганцем и литием» по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния принята к защите 08.10.2021 г. (протокол заседания № 7) диссертационным советом 24.1.228.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН), 660036, Красноярск, Академгородок, д. 50, приказ Минобрнауки № 1513/нк от 25.11.2016.

Соискатель Высотин Максим Александрович, 21 июля 1990 года рождения, в 2018 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский федеральный университет», выдавшее диплом об окончании аспирантуры по направлению подготовки «Физика и астрономия». Работает младшим научным сотрудником в лаборатории Фотоники молекулярных систем Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН.

Диссертация выполнена в лаборатории Физики магнитных явлений Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленного подразделения ФИЦ КНЦ СО РАН.

Научный руководитель – *Фёдоров Александр Семёнович*, доктор физико-математических наук, Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, ведущий научный сотрудник лаборатории Физики магнитных явлений.

Официальные оппоненты:

Чернозатонский Леонид Александрович, доктор физико-математических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, главный научный сотрудник, Отдел новых методов биохимической физики,

Пономарев Александр Николаевич, кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, заведующий лабораторией Молекулярного имиджинга и фотоакустики – дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», г. Москва, в своем положительном отзыве, подписанном доктором физико-математических наук, ведущим научным сотрудником Научно-исследовательской лаборатории «Неорганические наноматериалы», Сорокиным Павлом Борисовичем, указала, что диссертационная работа представляет собой оригинальное научное исследование, представляющее теоретическую и практическую ценность для дальнейшего изучения тонкопленочных материалов и совершенствования технологий их изготовления.

Соискатель по теме диссертации имеет 6 опубликованных работ в рецензируемых научных изданиях, а также 1 патент:

1. Visotin, M. A. Prediction of orientation relationships and interface structures between α -, β -, γ -FeSi₂ and Si phases / M. A. Visotin, I. A. Tarasov, A. S.

Fedorov [et al.] // Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials. – 2020. – Vol. 76, no. 3. – P. 469–482.

2. Tarasov, I. A. Selective synthesis of higher manganese silicides: new $\text{Mn}_{17}\text{Si}_{30}$ phase, its electronic, transport, and optical properties in comparison with Mn_4Si_7 / I. A. Tarasov, M. A. Visotin, T. V. Kuznetzova [et al.] // Journal of Materials Science. – 2018. – Vol. 53, no. 10. – P. 7571–7594.

3. Tarasov, I. A. Si/Fe flux ratio influence on growth and physical properties of polycrystalline $\beta\text{-FeSi}_2$ thin films on Si(100) surface / I. A. Tarasov, M. A. Visotin, A. S. Aleksandrovsky [et al.] // Journal of Magnetism and Magnetic Materials. – 2017. – Vol. 440. – P. 144–152.

4. Mikhaleva, N. S. Ab initio and empirical modeling of lithium atoms penetration into silicon / N. S. Mikhaleva, M. A. Visotin, Z. I. Popov [et al.] // Computational Materials Science. – 2015. – Vol. 109. – P. 76–83.

5. Fedorov, A. S. Theoretical Study of the Lithium Diffusion in the Crystalline and Amorphous Silicon as well as on its Surface / A. S. Fedorov, A. A. Kuzubov, N. S. Eliseeva, Z. I. Popov, M. A. Visotin, N. G. Galkin // Solid State Phenomena. Vol. 213. Trans Tech Publ. 2014. – P. 29–34.

6. Михалева, Н. С. Теоретическое исследование внедрения атомов лития в кремний / Н. С. Михалева, А. А. Кузубов, З. И. Попов, А. Д. Еремина, М. А. Высотин // Сибирский журнал науки и технологий. – 2015. – Т. 16, № 2. – С. 456–463.

7. Патент 2681635. Российская Федерация, МПК C30B23/08. Способ получения нанокристаллов силицида железа $\alpha\text{-FeSi}_2$ с изменяемой преимущественной ориентацией: № 2018104934: заявл. 08.02.2018: опубл. 11.03.2019 / И. А. Тарасов, И. А. Яковлев, М. А. Высотин, Т. Е. Смолярова, С. Н. Варнаков, С. Г. Овчинников. – 7 с.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы (все положительные):

Ведущая организация (ФГАОУ ВО «ННТУ «МИСиС»). Отзыв положительный. Замечания: 1) Не совсем понятна модель, представленная в Главе 3.

Почему в моделировании вакансионного дефекта использовалась одна элементарная ячейка, не сверхячейка? Число атомов в элементарной ячейке позволяет проводить расчёты сверхячеек большего размера. 2) Крайне сомнительным кажется утверждение авторов о необходимости двух вакансий по кремнию для р-допирования системы $\text{Mn}_{17}\text{Si}_{30}$. Такая высокая концентрация вакансий невозможна в реальности. Фактически речь идёт не о соединении $\text{Mn}_{17}\text{Si}_{30}$, а о $\text{Mn}_{17}\text{Si}_{28}$. Почему не были изучены другие структурные дефекты, а рассмотрены только вакансии как возможная причина наблюдаемого свойства? 3) Почему не проводилась оптимизация ячейки с вакансионным дефектом? Это приводит к появлению напряжений в структуре и влияет на конечный результат. Более того, автор утверждает, что «Оптимизированные параметры решетки для Mn_4Si_7 ($a = b = 5.498 \text{ \AA}$) и $\text{Mn}_{17}\text{Si}_{30}$ ($a = b = 5.505$ и $c = 73.840 \text{ \AA}$) хорошо согласуются с известными монокристаллическими экспериментами.» Сравнение с экспериментом приведено для оптимизированной структуры без дефектов, в то время как основной вывод работы состоит в том, что структура должна содержать существенное число вакансий, а значит именно параметры решётки дефектной структуры следует оптимизировать и сравнивать с экспериментом. 4) В главе 4 не описан метод расчёта энергии интерфейса и не приведены соответствующие формулы. Непонятно, почему линейная зависимость на Рис. 4.1в не совпадает с формулой ($\gamma_{\text{interface}} = -8,38896 \times R + 16,2426 \text{ эВ/нм}^2$), приведённой в тексте. Почему автор не рассчитал значения $\gamma_{\text{interface}}$ для $R = 1$, как наиболее выгодных границ раздела? 5) Иллюстративный материал в диссертации достаточно низкого качества.

Д.ф.-м.н., профессор, Чернозатонский Леонид Александрович — официальный оппонент. Отзыв положительный. Замечания: 1) Многие источники в литобзоре относятся к годам 2011–2015 и ранее. 2) Не совсем ясно преимущество предложенной модели предсказания интерфейсных плоскостей по сравнению с описанными ранее. 3) В некоторых местах диссертации не хватает более подробного рассмотрения обоснованности используемых допущений (о малости температурных изменений величин поверхностных энергий,

модулей упругости и т.д. на стр.60; отсутствие учета магнитных моментов, на стр. 61). 4) Терминология и оформление. 5) Сравнение коэффициентов диффузии на стр. 104 (из-за чего теоретическая зависимость количественно отличается от экспериментальной).

К.ф-м.н., Пономарев Александр Николаевич — официальный оппонент. Отзыв положительный. Замечания: 1) В диссертации не обсуждается возможность использования молекулярно-динамического моделирования для решения вопросов из глав 3 или 4. Например, почему этот метод не применялся для изучения режимов роста нанокристаллитов FeSi_2 ? 2) Из текста диссертации (глава 3) не ясно, каким образом стабилизирована структура $\text{Mn}_{17}\text{Si}_{30}$ с вакансиями для исследования атомных и зонных структур. 3) Во введении, в разделе «Актуальность темы» не аргументирована ссылкой актуальность использования силицидов на кремниевой подложке, хотя выше ссылки указаны при рассмотрении дисилицида железа. 4) В тексте иногда встречаются длинные перегруженные предложения и не совсем удачные формулировки, что затрудняет восприятие.

Д.ф-м.н., профессор, Галкин Николай Геннадьевич. Отзыв положительный. Замечания: 1) Из автореферата остается непонятным как от анализа встраивания нанокристаллов FeSi_2 под поверхность кремния в одном слое следует перейти к расчетам реальных нанокомпозитов со встроенными нанокристаллами, которые в настоящее время создаются методами твердофазной и молекулярно-лучевой эпитаксии? 2) Замечания к оформлению автореферата (английский язык в подписях и обозначения на рисунках, стилистические ошибки).

К.х.н. Еняшин Андрей Николаевич. Отзыв положительный. Замечания: 1) Ни в основном тексте автореферата, ни в подписях к рисункам не упомянута используемая параметризация метода DFT (тип и вид обменно-корреляционного потенциала и т. п.), что заставляет обращаться к тексту диссертации. 2) Из текста неясно, какие граничные условия использовались при

при моделировании диффузии Li в решётке Si. 3) Отсутствует обозначение осей на графике Рис. 3 в автореферате.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается соответствием направлений научных исследований, выполняемых оппонентами и реализуемых в ведущей организации, тематике представленной диссертационной работы, наличием публикаций и высоких достижений в соответствующей области исследований.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- В рамках теории функционала плотности рассчитана зонная структура новой фазы высшего силицида марганца $Mn_{17}Si_{30}$. Установлено, что бездефектная фаза $Mn_{17}Si_{30}$ должна иметь n-тип проводимости, но вакансии по кремнию могут приводить к понижению уровня Ферми и смене знака носителей на p-тип.
- Предложен новый метод определения ориентационных соотношений и интерфейсных плоскостей между фазами при эпитаксиальном росте. Показано согласие предсказаний метода с экспериментом в случае интерфейсов дисилицидов железа (α -, β - и γ - $FeSi_2$) с кремниевыми подложками.
- Предложено объяснение наблюдаемой в эксперименте смены эпитаксиальной фазы дисилицида, растущей на поверхности Si(001), с β - на α -фазу при температуре менее 900 K, в результате изменения напряжения интерфейсов силицид/кремний.
- Описана зависимость базовой ориентации и огранки кристаллитов α - $FeSi_2$ на подложке Si(001) от температуры и наличия сурфактанта.
- Проведено молекулярно-динамическое моделирование проникновения лития сквозь поверхность (001) кристаллического кремния с помощью специально подобранного многочастичного межатомного потенциала в рамках модели погруженного атома с угловой зависимостью. Описан механизм послойного роста слоя $Si_{0,5}Li_{0,5}$ с четким бездиффузным интерфейсом $Si_{0,5}Li_{0,5}/Si$.

Теоретическая значимость исследования заключается в объяснении механизмов роста и формирования свойств тонкоплёночных силицидов. Рассчитанные параметры межатомного потенциала могут использоваться в дальнейших теоретических исследованиях кремниевых наноструктур, применяемых в качестве анодов литий-ионных аккумуляторов.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики обуславливается тем, что описанные механизмы формирования структуры и свойств соединений кремния с металлами способствуют совершенствованию технологических процессов синтеза новых функциональных наноматериалов. Разработанный с участием соискателя «Способ получения нанокристаллов силицида железа α -FeSi₂ с изменяемой преимущественной ориентацией» запатентован.

Достоверность полученных результатов определяется корректностью выбранных приближений и алгоритмов, успешной апробацией предложенных методов и сопоставления полученных результатов с экспериментальными и теоретическими данными, имеющимися в литературе.

Личный вклад соискателя заключается в написании вычислительных программ, проведении расчетов, построении и адаптации предложенных моделей и методов, обработке и интерпретации результатов. Выбор направления и объектов исследования, а также подготовка публикаций осуществлялись совместно с научным руководителем и соавторами.

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.

На заседании 17.12.2021 г. диссертационный совет сделал вывод о том, что диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, содержит решение научной задачи, имеющей значение для развития физики конденсированного состояния, соответствует критериям, установленным Положением ВАК РФ о порядке присуждения учёных степеней, и принял решение присудить Высотину М.А. учёную степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 10 докторов наук по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени – 18, против присуждения ученой степени – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель
диссертационного совета 24.1.228.01
д.ф.-м.н., академик РАН

Ученый секретарь
диссертационного совета 24.1.228.01
д.ф.-м.н., с.н.с.

17 декабря 2021 года



Шабанов В. Ф.

Втюрин А. Н.