

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Высотина Максима Александровича

«Моделирование структуры и свойств соединений кремния с железом, марганцем и литием»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния

Целенаправленное создание тонкоплёночных силицидов переходных металлов на подложке кремния является перспективным направлением для повышения энергоэффективности электронных приборов и создания новых электрогенерирующих устройств. Технологический интерес вызывает также и неконтролируемое фазообразование на границе кремния и переходных металлов, уже как нежелательный процесс, приводящий к изменению эксплуатационных характеристик устройств.

С этой точки зрения диссертационная работа Высотина Максима Александровича является чрезвычайно актуальной и представляет богатые теоретические результаты в области материаловедения кремния, его взаимодействию с силицидами и металлами. Автором предложена структура и проведены квантовохимические расчёты электронных свойств нового соединения - $Mn_{17}Si_{30}$, которые, как оказывается, предопределяются точечными дефектами в подрешётке кремния. С использованием как феноменологических моделей, так и квантовохимических методов выполнена огромная и фундаментальная работа по изучению фазового состава и строению интерфейсов, а также росту островков дисилицида железа на подложке кремния. Примечательно, что все результаты прекрасно объясняют или обосновывают имеющиеся экспериментальные данные, указывают пути в регулировании синтеза тонких плёнок силицида, демонстрируя возможности современных теоретических представлений и методов. В заключении автор предлагает параметризацию метода молекулярной механики для реакции кремния с литием и исследует молекулярно-динамически диффузию лития в кремнии. Несомненно, помимо фундаментального и прикладного интереса этой части работы для электрохимии, такая работа служит базисом для будущей параметризации метода и решения более сложной задачи - изучения межфазных границ переходных металлов (и их силицидов) с кремнием.

Работа производит большое впечатление. При ознакомлении с авторефератом возник ряд замечаний:

- 1) Ни в основном тексте, 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 моделировании диффузии Li в решётке Si.
- 3) Отсутствует обозначение осей на графике Рис. 3.

Перечисленные замечания к автореферату касаются оформления. Достоверность результатов и личный вклад автора не вызывают сомнений. Результаты представлены автором на большом количестве международных и российских конференций и опубликованы, минимум, в 5 статьях в профильных журналах, входящих в признанные международные базы публикаций. Соискатель является соавтором 1 патента,

использующего выводы диссертационной работы. Считаю, что по своей актуальности, новизне, научной и практической значимости работа Высотина Максима Александровича «Моделирование структуры и свойств соединений кремния с железом, марганцем и литием» полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния.

Ведущий научный сотрудник Лаборатории квантовой химии и спектроскопии,
Института химии твердого тела Уральского отделения РАН,
к.х.н., 02.00.04 – Физическая химия
ул. Первомайская, 91, 620108 г. Екатеринбург, Россия
тел. +7 343 3745331, enyashin@ihim.uran.ru

Еняшин Андрей Николаевич



Подпись Еняшина А.Н. заверяю.

Ученый секретарь
Института химии твердого тела УрО РАН, к.х.н.

Богданова Екатерина Анатольевна

12.11.2021

