

Отзыв

официального оппонента на диссертационную работу Батурина Владимира Сергеевича «Структура, стабильность и термодинамические свойства нанокластеров», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Диссертационная работа Батурина В. С. посвящена теоретическому исследованию свойств нанокластеров кремния и алюминия. В ней затрагивается довольно широкий круг вопросов. При изучении кремниевых кластеров решаются задачи определения и анализа их атомной структуры, а также поиска корреляций между структурными особенностями и свойствами электронного спектра. На основе полученных данных рассматриваются свойства ансамбля невзаимодействующих кластеров $Si_{10}H_{2m}$. Далее, в рамках оболочечной модели изучены сверхпроводящие свойства, экспериментально обнаруженные в кластерах алюминия. Учитывая практическую значимость изучения кластеров кремния как ключевых элементов устройств нано- и оптоэлектроники, а также ряд вопросов фундаментального характера, связанных с фотолюминесценцией и сверхпроводимостью в кластерах, исследование этих объектов имеет большое значение. Работы, вошедшие в кандидатскую диссертацию Батурина В. С., являются заметным продвижением в указанных вопросах.

Представленная диссертационная работа состоит из введения, четырех глав и заключения. Первая глава посвящена обзору современных подходов к поиску структуры с минимальной энергией. В начале главы формулируются проблемы поиска глобального структурного минимума, связанные прежде всего со сложным характером гиперповерхности потенциальной энергии атомной системы. Затем приведены наиболее распространенные методы вычисления энергии атомной системы. Далее, в качестве наиболее часто используемых методов глобального поиска, кратко описываются методы имитации отжига, *basin-hopping* и метадинамика.

Вторая глава посвящена описанию теоретических и вычислительных методов для определения стабильных структур нанокластеров.

Третья глава содержит результаты исследования оптимальных структур нанокластеров из чистого кремния на основе первопринципного эволюционного расчета. Надо отметить, что

исследуются также метастабильные структуры, что является несомненным достоинством работы.

В четвертой главе анализируется фазовый состав ансамбля кластеров $\text{Si}_{10}\text{H}_{2m}$ при различных концентрациях пассивирующего газа и разных температурах.

В пятой главе исследуются корреляции между расположением атомов нанокластеров и свойствами их электронного спектра.

Говоря о диссертации в целом, хотелось бы отметить, полноту и систематичность изложения. Предложенная автором методика позволяет проводить топологическую классификацию возможных структур, позволяющую выделить конфигурации, различающиеся по топологии связей. **Достоверность полученных в диссертационной работе результатов подтверждается** сравнениями расчетов с экспериментальными данными.

Диссертация написана ясно, разработанные в диссертации методы могут найти применение при проектировании и расчетах свойств различных электронных устройств. Вместе с тем к работе имеются следующие замечания:

1. В обзоре не рассмотрены методы, более точно учитывающие многочастичные эффекты - такие как GW, coupled cluster, и др.
2. При расчете электронных спектров с помощью теории функционала плотности не обозначена известная проблема, связанная с тем, что в этой теории полупроводниковая щель получается меньше физической щели.
3. Предлагаемый метод расчёта электронного спектра нанокластеров переучитывает роль кулоновских корреляций. Возможно, автору следовало бы учесть парные корреляционные электронные функции, нормированные на среднее число электронов в данном одночастичном состоянии.

Указанные недостатки не снижают научной ценности диссертации. Диссертация В. С. Батурина является законченным научным трудом, который можно квалифицировать как детальное теоретическое исследование структурных и термодинамических свойств кластеров. Полученные в ней результаты являются новыми и представляют значительный интерес. Проведенные исследования докладывались на российских и международных конференциях, их результаты

опубликованы в открытой печати. Автореферат диссертации верно отражает её содержание. Работа В. С. Батурина полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ему искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Доцент кафедры квантовой электроники
Физического факультета ФГБОУ ВО
Московского Государственного Университета им. М. В. Ломоносова
доктор физико-математических наук,
119991 Москва, Ленинские горы, МГУ им. М.В. Ломоносова
+7(495)939-25-02, email: nsmaslova@gmail.com

/Н. С. Маслова/

27.01.2015

Подпись доцента д.ф.-м.н. Н. С. Масловой удостоверяю

Декан физического факультета,
доктор физико-математических наук,
профессор



/Н.Н.Сысоев/

Список публикаций официального оппонента Натальи Сергеевны Масловой за последние 5 лет по теме диссертации В. С. Багурина «Структура, стабильность и термодинамические свойства нанокластеров», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 — теоретическая физика

1. Arseev P.I., Maslova N.S., Mantsevich V.N., “Non-adiabatic electron charge pumping in coupled semiconductor quantum dots” *JETP Letters*, **95**, № 10, 521-527 (2012)
2. Mantsevich V.N., Maslova N.S., Arseev P.I. “Localized charge bifurcation in the coupled quantum dots” *Solid State Communications*, **152**, 1545-1550 (2012)
3. Arseyev P.I., Maslova N.S., Mantsevich V.N. “Charge and spin configurations in the coupled quantum dots with Coulomb correlations induced by tunneling current”, *European Physical Journal B* **85**, № 12, 410 (2012)
4. Mantsevich V.N., Maslova N.S., Arseyev P.I. “Charge trapping in the system of interacting quantum dots”, *Solid state communications* **168** 36-41 (2013)
5. Mantsevich V.N., Maslova N.S., Arseyev P.I. “Tunneling transport through multi-electrons states in coupled quantum dots with Coulomb correlations”, *Solid State Communications*, **199**, 33-38 (2014)
6. Mantsevich V.N., Maslova N.S., Arseyev P.I. “Non-stationary effects in the system of coupled quantum dots influenced by Coulomb correlations”, *JETP*, **118** (1), 136-147, (2014)
7. Mantsevich V.N., Maslova N.S., Arseyev P.I. “External field induced switching of tunneling current in the coupled quantum dots”, *JETP Letters*, **100** (4), 265-270 (2014)