

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Перминовой Марии Евгеньевны «Исследование физических свойств кубических кристаллов ZnX ($X=S, Se, Te$) методом функционала плотности», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Диссертация Перминовой М.Е. посвящена исследованию фундаментальных свойств полупроводниковых соединений $A^{II}B^{VI}$ состава ZnX ($X=S, Se, Te$). Актуальность темы диссертации обоснована во введении перспективностью использования данных соединений в оптоэлектронных приборах, полупроводниковых лазерах, детекторах ионизирующего излучения. Представленная работа посвящена разработке методологии расчета структурных, колебательных и электронных свойств соединений ZnX на основе метода функционала плотности. Основное внимание в работе уделяется выбору оптимальных параметров функционала плотности и псевдопотенциала для расчета колебательных и электронных свойств этих материалов. Поэтому данное исследование является актуальным для промышленного использования данных полупроводниковых соединений.

Кроме того, актуальность темы диссертации обусловлена возрастающим интересом к теоретическим методам расчета соединений с сильными электрон-электронными корреляциями, из-за которых могут заметно меняться свойства таких соединений. Поэтому разработка и апробация методов расчета сильно коррелированных систем и исследование зависимости их свойств от атомистической структуры и состава является фундаментальной научной задачей в области оптики полупроводников.

В первой главе Перминова М.Е. описывает теорию функционала плотности в применении к расчету физических свойств материалов, а также приводит имеющиеся в литературе экспериментальные и теоретические исследования свойств соединений ZnX ($X=S, Se, Te$). В частности, приводятся экспериментальные данные по дисперсии фононов в данных материалах, а также данные по упругим свойствам соединений ZnX . Автор приводит имеющиеся несоответствия между теоретическими и экспериментальными данными по свойствам материалов, указывающие на необходимость дальнейшей разработки методологии расчета таких соединений.

Выводы первой главы служат обоснованием целей работы, сформулированных во введении.

Вторая глава диссертации посвящена описанию методики первопринципных расчетов свойств материалов в приближении функционала плотности. Здесь приводится описание пакета ABINIT, использованного автором для последующих расчетов физических свойств соединений ZnX . Кроме того, автор приводит анализ по оптимизации параметров расчетов с использованием данного пакета, таких как максимальная кинетическая энергия базиса плоских волн, количество точек для интегрирования по зоне Бриллюэна, максимальные остаточные силы и др. Проведенный анализ служит обоснованием справедливости полученных автором в

следующих разделах результатов расчетов структурных, колебательных и электронных свойств соединений ZnX.

В третьей главе приводятся результаты исследований структурных, колебательных и электронных свойств соединений ZnX (X=S, Se, Te). Диссертантом впервые проведен анализ влияния параметров псевдопотенциала Zn и Хаббардовской коррекции теории функционала плотности на дисперсию фононов в соединениях ZnX. Было установлено, что учет Хаббардовской коррекции для ZnSe приводит к уменьшению частот оптических фононов TO и LO и продольных акустических фононов LA. Интерес представляет полученный автором результат, что при учете локального кулоновского взаимодействия уменьшается объемный модуль и почти на 20% увеличивается модуль сдвига материала. Для повышения точности вычисления дисперсии фононов в ZnS автор создал новый сохраняющий норму псевдопотенциал для Zn с расширенной валентной оболочкой, что улучшило согласие с экспериментальными данными для данного материала. Данный результат имеет большое практическое значение для расчетов физических свойств других полупроводниковых соединений на основе Zn.

В четвертой главе автор провел анализ полученных результатов при помощи исследования распределения по орбиталям размера локализации электронов, эффективных зарядов атомов, спроектированной электронной плотности, переноса заряда и ионности связи Zn-X. Было получено, что размер локализации электронов на p орбиталях халькогенов более чем на порядок превышает размер локализации на других орбиталях. Автором выдвинуто предположение, что данное свойство может влиять на точность расчета дисперсионных кривых. Кроме того, автор при помощи расчета эффективных зарядов Сцигетти показал что ионность связи Zn-X коррелирует с s-d гибридизацией и уменьшается в ряду ZnS-ZnSe-ZnTe. Проведенный анализ несомненно полезен для понимания тенденций в изменении физических свойств полупроводниковых соединений A^{II}B^{VI}.

По работе имеется ряд замечаний:

1. Не понятно, как результаты анализа выбора псевдопотенциала в разделе 2.3.5 использовались в дальнейших расчетах.
2. В выводах главы 2 говорится о влиянии увеличения числа учитываемых в псевдопотенциале валентных электронов на точность расчетов, однако, соответствующих результатов в этой главе представлено не было.
3. Автор не указал, использовалась ли нелинейная коррекция плотности остова при построении сохраняющего норму псевдопотенциала для Zn.
4. В выводах не совсем правильно указано, что корректное описание дисперсии фононов достигается при включении всех электронов с главным квантовым числом $n = 3$ в атоме Zn для всех рассмотренных систем. Данный вывод, судя по результатам автора, не является справедливым для системы ZnTe.

Указанные замечания не снижают общей высокой оценки данной диссертационной работы. В целом работа показывает высокую квалификацию автора в данной научной области. Результаты диссертации опубликованы в 3

статьях в ведущих российских журналах и доложены на тематических конференциях. Опубликованные материалы и автореферат правильно и полно отражают содержание диссертации.

Диссертация отвечает всем требованиям, предъявляемым ВАК России к кандидатским диссертациям, а ее автор, Перминова Мария Евгеньевна, несомненно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 – оптика.

Книжник Андрей Александрович
кандидат физ.-мат. наук,
старший научный сотрудник
Курчатовского комплекса физико-химических технологий
НИЦ «Курчатовский институт»
e-mail: Knizhnik_AA@nrcki.ru
Тел: 8(499) 196-7362


Подпись А.А. Книжника заверяю

Главный ученый секретарь

НИЦ «Курчатовский институт», к.ф.-м.н.

Москва, пл. Курчатова д.1, 123182



 Стремоухов С.Ю.