

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.023.02 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ
НАУКИ ФИЗИЧЕСКОГО ИНСТИТУТА ИМ. П.Н. ЛЕБЕДЕВА РОССИЙСКОЙ
АКАДЕМИИ НАУК ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 21 марта 2022 г. №49

О присуждении Бушлановой Наталье Александровне, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Атомное строение и особые свойства наночастиц на основе кремния» по специальности 01.04.02 – теоретическая физика принята к защите 27 декабря 2021 года, протокол №48 диссертационного совета Д 002.023.02, созданного 09 ноября 2012 года приказом No 717/нк на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института имени П.Н. Лебедева Российской академии наук (ФИАН), 119991 ГСП-1 Москва, Ленинский проспект, д. 53.

Соискатель Бушланова Наталья Александровна, 11 декабря 1992 года рождения, в 2017 году закончила Факультет общей и прикладной физики Московского физико-технического института (МФТИ), защитив магистерскую дипломную работу. С 1 сентября 2017 года обучалась в аспирантуре МФТИ по направлению «физика и астрономия» и закончила ее 10 июля 2021 года, получив диплом об окончании аспирантуры с присвоением квалификации «Исследователь. Преподаватель-исследователь». Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана МФТИ в 2021 году. С января 2016 года по настоящее время Н.А.Бушланова работает в Лаборатории теории сверхпроводимости и статистической физики сложных систем ФИАН, с 2017 года — в должности младшего научного сотрудника.

Диссертационная работа Н.А. Бушлановой выполнена в Отделении теоретической физики им. И.Е.Тамма ФИАН.

Научный руководитель — доктор физико-математических наук Успенский Юрий Алексеевич, высококвалифицированный главный научный сотрудник Лаборатории теории сверхпроводимости и статистической физики сложных систем ФИАН.

Официальные оппоненты:

1. Рыжов Валентин Николаевич, доктор физико-математических наук, заместитель директора по науке Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской Академии Наук (ИФВД РАН),

2. Рыбковский Дмитрий Владимирович, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский Институт науки и технологий», дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация - Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт спектроскопии Российской академии наук (ИСАН), в своем положительном отзыве, подписанном кандидатом физико-математических наук, профессором Лозовиком Юрием Ефремовичем, и утвержденном доктором физико-математических наук, профессором Задковым Виктором Николаевичем, директором ИСАН, указала, что соискатель заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук.

Соискатель имеет 4 опубликованных работы, в том числе по теме диссертации опубликовано 3 работы в рецензируемых изданиях, индексируемых в базах Web of Science, Scopus. Результаты работы были представлены в 6 докладах на российских и международных конференциях.

В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем Н.А. Бушлановой работах.

Наиболее значимые результаты по теме диссертации опубликованы в работах:

1. V.S. Baturin, S.V. Lepeshkin, N.A. Fokina, Yu.A. Uspenskii, E.V. Tikhonov «Spin ordering in semiconductor nanoparticles without magnetic element atoms», JMMM, August 2018, Vol. 459, pp. 272-275,

2. Vladimir Baturin, Sergey Lepeshkin, Natalia Bushlanova, and Yurii Uspenskii «Atomistic Origins of Charge Traps in CdSe nanoclusters», Phys. Chem. Chem. Phys., 2020, 22, 26299-26305.

3. Natalia Bushlanova, Vladimir Baturin, Sergey Lepeshkin, and Yurii Uspenskii «The amorphous - crystalline transition in Si_nH_{2m} nanoclusters», Nanoscale, 2021, 13(45), pp.19181-19189.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается наличием у них признанных достижений в области теоретического исследования наноразмерных материалов.

Диссертационный совет отмечает, что в диссертации проведены исследования термодинамических и электронных свойств кластеров на основе кремния, а также электронных свойств и зарядовых ловушек кластеров кадмий - селен. Все исследования проведены на основе масштабных первопринципных расчетов кластеров, включающих глобальную оптимизацию их структуры. Среди выполненных соискателем исследований диссертационный совет отмечает следующие результаты:

1. Вычислена глобально-оптимизированная структура для больших групп нанокластеров Si_nH_{2m} с $n \leq 21$, $2m \leq 30$ и Cd_nSe_m с $n, m \leq 15$, а также кластеров Si_nO_m с $m \geq 2n$.

2. Показано, что кластеры Si-H по своему строению делятся на три типа (в порядке увеличения пассивации водородом): (1) аморфные кластеры с оборванными электронными связями, не обладающие термодинамической устойчивостью; (2) аморфные кластеры без оборванных электронных связей; (3) кристаллические кластеры. Выяснено, что основным механизмом, управляющим изменением структуры и переходом кластеров Si-H из кристаллического в аморфное состояние, является ликвидация оборванных электронных связей за счет образования новых межатомных Si-Si связей.

3. Построена фазовая P-T диаграмма, описывающая области существования основных фаз в наносистеме Si-H, согласующаяся с известными на сегодняшний день экспериментальными данными.

4. Исследованы спиновые свойства кластеров Si_nO_m с кислородными радикалами на поверхности. Показано, что все кластеры этого типа являются магнитными, с преобладанием антиферромагнитного упорядочения спинов.

5. На основе вычисленной в нанокластерах Cd_nSe_m локализации электронных состояний изучено атомное строение и свойства ловушек в наночастицах CdSe. Показана тесная связь между неустойчивостью кластеров и образованием в них ловушек заряда. Найденные ловушки по своему строению отнесены к 3 типам и 8 подтипам, из которых 7 - новые. Показано, что захват носителей заряда в ловушках осуществляется тремя квантовыми механизмами. Два из них описаны впервые.

Все основные результаты, включенные в диссертацию Н.А. Бушлановой, получены автором лично либо при её непосредственном участии.

Анализ и интерпретация полученных результатов, подготовка материалов к опубликованию производилась автором лично или в сотрудничестве с соавторами.

Достоверность и обоснованность результатов обусловлена использованием хорошо апробированных методов, зарекомендовавших себя в нанофизике, физике кристаллов и физике высоких давлений. Результаты выполненных в диссертационной работе расчетов согласуются с имеющимися на сегодняшний день данными эксперимента.

Научная новизна полученных результатов обусловлена впервые выполненными расчетами глобально-оптимизированной структуры в больших группах нанокластеров Si_nH_{2m} и Cd_nSe_m , а также кластеров Si_nO_m , что послужило основой для изучения электронных, структурных, фоновых, термодинамических и других свойств этих наноматериалов. В частности: обнаружен механизм, управляющий изменением структуры и переходом из кристаллического в аморфное состояние в кластерах Si-H; построена фазовая P-T диаграмма этой наносистемы; описана тесная связь между стабильностью кластеров Si-H и их электронными свойствами. Новым подходом является и исследование локализации электронных состояний в большой группе кластеров Cd_nSe_m , что позволило выделить группы атомов, ответственные за образование ловушек заряда в наночастицах CdSe. Проведена классификация найденных ловушек и объяснены механизмы захвата ловушками носителей заряда.

Практическая значимость работы заключается в нахождении условий появления кристаллического состояния в наночастицах Si-H, что приводит к сильному (более, чем на порядок) увеличению квантового выхода фотолюминесценции. Другим практически важным результатом является определение атомного строения ловушек заряда в наночастицах CdSe, сильно ухудшающих фотолюминесцентные и транспортные свойства наночастиц. Эта информация позволит разработать методы более эффективного подавления ловушек.

Автореферат соответствует содержанию диссертационной работы.

В ходе защиты соискатель Н.А. Бушланова ответила на заданные ей вопросы от членов диссертационного совета, а также на замечания ведущей организации и оппонентов.

На заседании 21 марта 2022 года диссертационный совет принял решение: присудить Н.А. Бушлановой учёную степень кандидата физико-математических наук за решение научной задачи по определению условий возникновения кристаллического состояния в нанокластерах кремний – водород, построение фазовой P-T диаграммы этой системы и установление атомного строения ловушек

заряда в нанокластерах CdSe, что является научным достижением, имеющим важное значение для физики наноразмерных структур.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 6 докторов по специальности рассматриваемой диссертации (01.04.02 – «Теоретическая физика»), участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали:

за присуждение учёной степени - 18,
против присуждения учёной степени — 0,
недействительных бюллетеней — 0.

Председатель диссертационного совета,
член-корреспондент РАН, д.ф.-м.н.

Арсеев Петр Иварович

Учёный секретарь диссертационного совета,
к.ф.-м.н.

Вагин Константин Юрьевич

21 марта 2022 г