

ОТЗЫВ

председателя диссертационного совета Филатовой Елены Олеговны на диссертацию Тарасова Артема Вячеславовича на тему «Развитие методик анализа фотоэмиссии квазидвумерных структур на примере графена и 4f-систем», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Основной тенденцией современного развития высоких технологий является переход к нанометровому масштабу синтезируемых структур и слоев. Уменьшение топологических размеров структур ведет к существенному увеличению роли процессов, происходящих на поверхностях и межфазных границах. Прогресс нанотехнологий требует развития новых адекватных методов изучения и предсказания электронной и магнитной структур наносистем.

Квазидвумерные соединения редкоземельных элементов вызывают огромный интерес в научном сообществе благодаря своим уникальным свойствам и связанными с ними физическими явлениями. До сих пор основные усилия исследователей были направлены на изучение свойств этих материалов в объеме. В силу разных причин явления на поверхностях и межфазных границах в таких материалах игнорировались. Магнитные свойства редкоземельных элементов представляют огромный интерес не только для фундаментальных исследований, но и имеют большое прикладное значение: использование их в качестве постоянных магнитов для создания силовых генераторов и электродвигателей, для электронных носителей информации, а также, в недалеком будущем, в спинтронике. Для последнего приложения ключевыми являются процессы спиновой инжекции и магнитной поляризации состояний проводимости, которые в значительной степени зависят от свойств поверхности и интерфейса. Поэтому детальное изучение свойств этих состояний с целью выявления их отличия (совпадения) от объемных свойств материалов крайне важно. В этой связи, работа Тарасова А.В., посвященная развитию новых подходов в фотоэмиссионной спектроскопии на базе совместного использования таких методов анализа поверхности как фотоэлектронная спектроскопия, фотоэлектронная дифракция и фотоэлектронная голография с целью изучения электронных и структурных свойств поверхностей представляется несомненно **актуальной**.

Работа представляет собой законченное исследование, в ходе которого реализовано комплексное исследование, базирующееся на применении разработанных Тарасовым А.В. теоретических и экспериментальных подходов для анализа электронных и структурных

свойств поверхностей, на примере редкоземельных интерметаллидов (CeIrIn_5 , TbRh_2Si_2 и EuIr_2Si_2) и систем на основе графена.

Важным достоинством работы является сочетание разработки методологии моделирования и анализа экспериментальных данных, что позволило Тарасову А.В. определить оптимальные условия измерений на основе теоретического предсказания результатов и, таким образом, достоверно выявить эффекты, связанные со структурой поверхностных состояний и объяснить их роль в формировании тех или иных явлений. В частности, была обнаружена гигантская релаксация Tb-терминации кристалла TbRh_2Si_2 .

На мой взгляд особый интерес представляют:

1) Впервые выявленная в системе CeIrIn_5 реконструкция In-терминации. Установлено, что появление реконструкции In-терминации существенно меняет вид поверхностных электронных состояний. Последующие теоретические расчеты для родственных материалов CeCoIn_5 и CeRhIn_5 позволили предположить существование аналогичной поверхностной нестабильности и во многих других двумерных сильно коррелированных f-системах.

2) Показана возможность получения информации с разрешением по глубине о структуре поверхности кристалла, химическом состоянии атомов редкоземельных элементов и их связи с магнитным порядком в слоистом редкоземельном интерметаллическом материале с незаполненной 4f оболочкой на основе данных фотоэлектронной дифракции.

3) Возможность получения структурной информации из анализа угловых распределений интенсивностей отдельных компонент 4f-мультиплета. В результате моделирования картин фотоэлектронной дифракции для 6G_1 компоненты 4f-мультиплета Tb в TbRh_2Si_2 и ее сравнения с соответствующей экспериментальной картиной определено межслоевое расстояние на Tb-терминации и обнаружена гигантская релаксация в направлении вглубь кристалла.

В прикладном аспекте следует отметить, что полученные результаты создают основу для будущих исследований многих низкоразмерных систем, основанных на совмещенном фотоэлектронном дифракционном-голографическом анализе, предназначенном для структурного анализа 2D-материалов и их интерфейсов с использованием низкоэнергетических фотоэлектронов.

Сочетание результатов расчетов, проведенных в рамках теории функционала плотности при использовании современных программных пакетов, и использования современной хорошо апробированной экспериментальной измерительной техники исследовательских станций на каналах вывода синхротронного излучения позволило

достичь высокой информативности исследований, а также обеспечить **достоверность** полученных результатов. Основные результаты работы опубликованы и прошли рецензирование в международных научных журналах, что подтверждает достаточную **обоснованность** сформулированных в диссертации научных положений, выводов и рекомендаций.

Диссертация построена логично, изложена грамотным языком и хорошо иллюстрирована. По каждой главе и работе в целом сделаны четкие выводы. К сожалению, автору не удалось полностью избежать опечаток, повторяющихся слов и неудачных формулировок, которые, однако, не затрудняют чтение.

При знакомстве с диссертационной работой возникли следующие вопросы и замечания:

1. Несмотря на всю логичность построения диссертации, первая и вторая главы избыточно описаны описанием основополагающих методов и их детализацией. Практически половина диссертации нацелена на подготовку читателя к последующим изысканиям диссертанта.
2. Для проведения теоретической оценки параметров кристаллического поля в работе используется преобразование блоховских функций в максимально локализованные функции Ванье с помощью вычислительного пакета wannier90. На основе данного вычислительного пакета осуществляется подбор элементов U^k матрицы, которая смешивает состояния Блоха для каждого квазиимпульса k , обеспечивающих максимальную локализацию ВФ на своих центрах. Однако, как отмечает автор, из-за наличия у функционала Ω локальных минимумов процесс минимизации может привести к зависимости окончательного решения от первоначального выбора U^k . Возникает вопрос, как скажется на оценке параметров кристаллического поля достижение одного из локальных минимумов функционала Ω вместо глобального.
3. Для автоматизации процесса определения числа экстремумов F_p для спроецированной фотоэлектронной дифракционной картины автор применил автокорреляционную функцию. Число особенностей определялось как отношение полной площади ФД картины и площади сечения центрального пика в точке $f_p(x', y')$ на уровне 39.1% от его высоты. Этот уровень был рассчитан для случая идеальной круглой особенности, размер которой равен сечению автокорреляционной функции на этом конкретном уровне. Насколько правомерно это приближение в общем случае?
4. В диссертации указывается, что при расчете ФД картин было учтено многократное рассеяние фотоэлектронов, но каким образом не сказано. Хотелось бы узнать процедуру учета этого эффекта.

Сделанные выше замечания не снижают научной ценности работы и не влияют на общее положительное впечатление от диссертационной работы, которая выполнена на высоком теоретическом и экспериментальном уровнях. По **актуальности** темы, **объему** и **достоверности** представленных результатов, **глубине** и **значимости** выводов работа

полностью соответствует уровню диссертации на соискание степени кандидата наук. Полученные автором результаты представлены в пяти статьях, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базах данных РИНЦ, Web of Science и Scopus и многократно им представлены и обсуждены на конференциях. Уровень публикаций достаточно высокий.

Считаю, что диссертация Тарасова Артема Вячеславовича на тему «Развитие методик анализа фотоэмиссии квазидвумерных структур на примере графена и 4f-систем» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», а соискатель Тарасов Артем Вячеславович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния. Пункты 9 и 11 указанного Порядка диссертантом не нарушены.

Председатель диссертационного совета
Доктор физико-математических наук, профессор,
Профессор Санкт-Петербургского
государственного университета



Филатова Е.О.

Дата 06.02.2023 г.