

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Гребенникова Владимира Иосифовича на диссертационную работу Тарасова Артема Вячеславовича на тему «Развитие методик анализа фотоэмиссии квазидвумерных структур на примере графена и 4f-систем», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа А.В. Тарасова посвящена разработке нового экспериментального метода исследования локального атомного строения поверхности слоистых соединений на основе анализа картины углового распределения фотоэлектронов, вышедших из образца с фиксированной кинетической энергией. Используя монохроматическое синхротронное излучение, можно селективно исследовать фотоэлектроны из выбранного энергетического уровня атома заданного химического элемента. Интерференция сферической электронной волны от центрального источника и упруго рассеянных волн на атомах окружения порождает картину фотоэлектронной дифракции (ФД) - причудливую систему чередующихся максимумов и минимумов в угловом распределении детектируемого фототока. В отличие от рентгеновской дифракции фотоэлектроны (~ 100 эВ) имеют малую длину упругого пробега в несколько межатомных расстояний. И это хорошо, поскольку дает уникальную информацию об атомной структуре поверхности. Плохо другое, очень сложна процедура определения координат атомов по экспериментальным данным. Требуется расчет многократного рассеяния фотоэлектрона на атомах, удаление неупругого фона потерь, да и поверхность обычно состоит не из одного кристаллического монослоя. Обратная задача рассеяния не имеет регулярного алгоритма решения. Приходится задавать атомную структуру, вычислять картину фотоэлектронной дифракции, сравнивать ее с экспериментальной, затем изменять геометрию атомов, снова сравнивать с экспериментом. Процедура подгонки продолжается до достижения оптимального согласования.

Автор прошел весь этот путь от начала до конца, разработал и апробировал надежный метод получения атомной структуры поверхности по экспериментально измеренному угловому распределению фототока.

Основная часть диссертации теоретическая, связанная с использованием компьютерных методов расчета, но не менее существенно и то, но автор принимал участие в постановке и проведении экспериментальных измерений. Это очень важно для формирования исследователя и для пользы дела.

Разработанный метод был применен к двум разным типам новых слоистых соединений. Это графен на подложке металла до и после легирования примесными атомами и интерметаллиды на основе редкоземельных элементов типа TbRh₂Si₂,

EuIr_2Si_2 . Полученные результаты имеют самостоятельное значение для физики поверхности упомянутых соединений, включая магнетизм поверхности РЗМ. Таким образом, выбранная тема вдвойне актуальна, по методам и по результатам.

Обращаясь к структуре и основному содержанию работы, следует отметить подробное и дружественное по отношению к читателю изложение материала. Примерно половину текста занимает обзор литературы, используемых экспериментальных и теоретических методов. В данном случае это вполне оправданно, потому что требуется подробное описание спектральных и дифракционных методов, физики поверхности, методов расчета атомных 4f-состояний и теории многократного рассеяния.

В третьей главе изложены основы разработанной процедуры поиска оптимальной атомной структуры поверхности образца посредством минимизации R-фактора, отражающего невязку экспериментальной ФД картины и рассчитанной в рамках теории многократного электронного рассеяния. Применение этой методики продемонстрировано на примере анализа структуры поверхности CeIrIn_5 . Удалось остановить причину наличия (на поверхности CeIn -терминации) и отсутствия (In -терминация) расщепления спин-поляризованных состояний, которая заключается в обнаруженной структурной реконструкции индиевой поверхности. Кроме того, также реализован новый метод фотоэлектронной голографии, обеспечивающий высокую точность голографического анализа 2D материалов. Был исследован интерфейс В-графен/ $\text{Co}(0001)$ - допированный бором графен на поверхности кобальта. Удалось измерить доли атомов бора, находящегося в подрешетке графена, расположенной на атомах кобальта и в другой подрешетке, центрованной между Co -атомами.

В Главе 4 развиты методики моделирования фотоэмиссии из 4f-оболочки РЗЭ в поверхностном слое соединений. Рассчитаны 4f фотоэлектронные спектры для состояний с различными проекциями полного момента на ось квантования. Этот набор спектров позволяет видеть на эксперименте, как направление магнитных 4f-моментов может изменяться на поверхности кристалла относительно объема. Показано, что магнитные моменты Tb в TbRh_2Si_2 , имеющие в объеме АФМ порядок перпендикулярно к поверхности, изменяют свое направление и располагаются в плоскости первого атомного слоя. На примере слоистого кристалла EuIr_2Si_2 показано, каким образом энергетическое расщепление линий от состояний с переменной валентностью в объеме и на поверхности может быть использовано для определения таких свойств этого материала, как валентность и магнитный порядок на поверхности и в более глубоких атомных слоях по экспериментальным картинам фотоэлектронной дифракции.

В целом, диссертация представляет собой законченную научную исследовательскую работу, содержащую решение актуальной задачи разработки новых методов определения атомной структуры поверхности.

Замечания по диссертационной работе

Стр. 129. «Глава 4. Методики анализа фотоэмиссии из открытой 4f-оболочки»

В заголовках, наверное, лучше придерживаться традиционной терминологии: «незаполненная оболочка». Хотя открытая-закрытая тоже понятно. В обзоре, стр. 46, сделан резкий сачок от «круговой поляризации» к «спину фотона». Было бы уместно пояснить, что это одно и то же (еще есть и третье название – «спиральность»).

Стр.117. «Для исследования выбранных нами в данной работе интерфейсов графена общее количество включенных в АИКР-ММЭ анализ конфигураций составляло либо 4608, либо 9216 структур, в зависимости от выбранного диапазона высот.»

Не определено, что такое структура. Координаты химических элементов в кластере из 400 атомов? Чем одна структура отличается от другой? Сколько структур осталось после оптимизации?

Стр. 136. «... из классической 4f-фотоэмиссии можно получить существенную информацию об основном 4f-состоянии и ориентации магнитных моментов в отдельных атомных слоях вблизи поверхности кристалла.»

Подобные утверждения встречаются и в других местах диссертации. Все-таки, о связи фотоэмиссии и магнетизма следует высказываться более аккуратно. Действительно, положение и интенсивность фотоэлектронной линии зависят от абсолютной величины проекции полного магнитного момента атома на ось квантования (но, к сожалению, не зависит от знака проекции). Так состояния +6 и -6 дают одинаковый спектр, то есть спектр не зависит ни от ориентации магнитного момента, ни от магнитного порядка: ферромагнетик, антиферромагнетик, парамагнетик с одинаковыми атомными магнитными числами имеют одинаковые ФЭ спектры.

Стр.176. «Рисунок 4.13. (g, h) Измеренные температурные зависимости TbRh₂Si₂ для отношения интенсивностей 4f-ФЭ в областях 1 и 2, показанных в (с), сравниваются с теоретическими кривыми, полученными для различных ПКП».

На рисунке показано температурное изменение спектров, а также их интегральных интенсивностей в двух энергетических интервалах. Поскольку в работе обсуждается связь фотоэмиссии и магнетизма, то возникает вопрос. Можно ли на основании приведенных данных сделать заключение о температурной зависимости намагниченности поверхности или объема?

Претензии к тексту диссертации, однако, не отменяют ее основных результатов.

Внимательное чтение диссертации убеждает, что выводы, сделанные автором, и формулировка основных положений, выносимых на защиту, верны и не вызывают возражений. Наиболее значительные результаты диссертации выше подробно проанализированы и им уже дана весьма высокая оценка. Диссертация представляет цельное исследование, содержит четкие формулировки цели работы и соответствующие им выводы.

Новизна исследования характеризуется выбором темы, оригинальностью подхода к обработке экспериментальных данных. Теоретический и математический анализ проведен на высоком уровне. Достоверность результатов обеспечивается использованием лучших экспериментальных методик, современных вычислительных методов и возможностью экспериментальной проверки результатов.

В целом можно утверждать, что диссертация А.В. Тарасова выполнена на весьма актуальную тему и на высоком научном уровне. В диссертации решена задача, имеющая существенное значение для физики конденсированного состояния, которую можно сформулировать как создание метода получения количественных характеристик атомной структуры поверхности на основе развития и применения угловых и спектральных методов фотоэмиссии.

Включенные в диссертацию материалы получили своевременное и достаточное отражение в научной печати и докладах на конференциях. Они известны научной общественности, цитируются и обсуждаются.

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», соискатель Тарасов Артем Вячеславович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не обнаружены.

Член диссертационного совета

Доктор физико-математических наук, профессор

главный научный сотрудник ИФМ УрО РАН
07.02.2023

В.И. Гребенников В.И. Гребенников



Подпись *И.Ю. Арапова*
Секретарю
И.Ю. Арапова
« 7 » февраля 2023 г.