

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Виноградова Александра Степановича 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.

Разработка эффективных методик выращивания и функционализации слоев двумерных (2D) конденсированных систем (графена, гексагонального нитрида бора h -BN, силицена, борофена и др.), детальная диагностика атомных и электронных свойств исходных и функционализированных слоёв, а также их успешное применение в ряде нанотехнологий для создания различных устройств является в настоящее время одним из важнейших направлений исследований в физике конденсированного состояния и современном научном материаловедении. Диссертационная работа **Тарасова А.В.** посвящена развитию методик анализа данных фотоэлектронной дифракции (ФД) и голографии (ФГ) и их использованию для исследования интерфейсов слоев графена и борграфена на $\text{Co}(0001)$, а также некоторых слоистых интерметаллидов редкоземельных элементов (РЗЭ) и, вне всякого сомнения, является **актуальной**.

Диссертационная работа **Тарасова А.В.** состоит из введения, четырех глав и заключения. Она изложена на 212 страницах, включает 53 рисунка и 5 таблицы, а также содержит список цитируемой литературы из 247 наименований. Во *введении* обоснована актуальность темы исследования, указаны основная цель и задачи диссертационной работы, отмечены научная новизна и практическая значимость полученных результатов, описаны методология и методы выполненного исследования, сформулированы положения, выносимые на защиту, и приведены сведения об апробации результатов.

В первой главе "*Обзор литературы*" дано описание методик анализа структуры поверхности с помощью ФД, рассмотрены результаты ранее выполненных фотоэмиссионных (ФЭ) исследований магнетизма поверхности, представлено краткое обсуждение кристаллического строения и электронной структуры монослоев графена на поверхности переходных металлов, а также интерметаллидов на основе редкоземельных элементов. Здесь же обсуждены теоретические основы метода фотоэлектронной дифракции и основные направления его применения, принципы фотоэлектронной голографии, спектроскопические методики исследования магнетизма, магнитный дихроизм в фотоэмиссии на примере $\text{Tb}(0001)$ и ряд других вопросов, относящихся к теме диссертации.

Вторая глава "*Экспериментальные и теоретические методы*" посвящена описанию экспериментальных методов, использованных для характеристики атомно-электронного строения наноструктур на основе графена и интерметаллидов РЗЭ: рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии (РФЭС) основных уровней и валентной зоны, в т.ч. с угловым разрешением (ФЭСУР), фотоэлектронной дифракции (ФД) и голографии (ФГ), дифракции медленных электронов (ДМЭ). Здесь же описаны экспериментальные установки ALOISA (Elettra центр СИ, Италия) и PEARL (SLS центр СИ, Швейцария), которые были использованы в работе для экспериментов по ФД, а также достаточно подробно рассмотрены детали использования программного кода EDAC для моделирования картин ФД и проведения в рамках теории функционала плотности (ТФП) расчетов атомно-

электронного строения твердых тел. Теоретические подходы проиллюстрированы результатами расчетов для систем на основе графена и интерметаллидов.

В третьей и четвертой главах приведены данные о проведенных автором экспериментальных и теоретических исследованиях и полученные им результаты по изучению интерфейсов графена и бор-графена на $\text{Co}(0001)$ и поверхностных свойств квазидвумерных интерметаллидов РЗЭ: описаны разработанные методики моделирования и анализа данных ФД и детали нового метода ФГ, рассмотрена методика теоретического моделирования ФЭ спектров атомов РЗЭ из открытой $4f$ -электронной оболочки, представлен способ определения направления магнитных $4f$ -моментов с помощью ФЭС, рассмотрены методы использования ФД для определения валентности и магнетизма отдельных атомных слоев соединений РЗЭ, описана возможность использования $4f$ -фотоэмиссии для исследования кристаллического поля и проанализированы перспективы получения структурной информации о поверхностном слое из данных ФД с использованием компонентов мультиплета ФЭ $4f$ -спектра РЗ атома.

В целом работу **Тарасова А.В.** можно охарактеризовать как оригинальное и успешное исследование атомно-электронных свойств для перспективных 2D-систем на основе графена, В-графена и некоторых слоистых интерметаллидов РЗЭ. Все экспериментальные исследования этих систем выполнены в сверхвысоком вакууме с использованием оборудования ведущих центров СИ Европы, что обеспечило автору возможность полноценного использования современных экспериментальных методов – РФЭС основных уровней и валентной зоны, в т.ч. с угловым разрешением (ФЭСУР), ФД и ФГ, ДМЭ. Для анализа и проверки экспериментальных результатов были применены современные методы ТФП с двумя видами обменно-корреляционного потенциала – обобщенное градиентное приближение (GGA) и приближение локальной плотности (LDA). Все расчеты были выполнены с использованием популярных вычислительных программных пакетов – WIEN2k и FPLO-14.00-48, обеспечивающих высокое качество расчетов.

В работе получен целый ряд новых интересных результатов, определяющих **научную новизну и практическую ценность** диссертации, среди которых:

- (i) Установленная методом ФД $(\sqrt{2} \times \sqrt{2})R45^\circ$ реконструкция поверхности кристалла интерметаллида $\text{CeIrIn}_5(001)$ с индиевой терминацией и её атомное строение.
- (ii) Апробация метода фотоэлектронной голографии, разработанного для изучения структуры двумерных систем, на системах графен/ $\text{Co}(0001)$ и В-графен/ $\text{Co}(0001)$, и обнаружение различной степени асимметрии легирования двух графеновых подрешеток бором в случае В-графен/ $\text{Co}(0001)$.
- (iii) Различия в ориентации магнитных моментов $4f$ -оболочки РЗ атомов Tb на поверхности по отношению к объему в интерметаллическом соединении TbRh_2Si_2 , установленные с помощью разработанной методики определения ориентации магнитных моментов РЗ ионов в приповерхностных слоях кристаллов на основе анализа ФЭ спектров $4f$ -оболочки.
- (iv) Определение валентности РЗ атома Eu с флуктуирующей валентностью в кристалле EuIr_2Si_2 и характеристика магнетизма его слоев с РЗ атомами вблизи и на поверхности кристалла с помощью анализа данных ФД.
- (v) Информация о кристаллическом поле в слоях РЗ атомов вблизи поверхности кристалла TbRh_2Si_2 из анализа температурной зависимости сигнала ФЭ мультиплета $4f^n$ -оболочки РЗ атома Tb.

Обоснованность и достоверность основных результатов и выводов диссертации **Тарасова А.В.** обеспечиваются корректностью постановки задач работы, высоким уровнем используемой экспериментальной техники в сочетании с мощными спектроскопическими методиками и DFT расчетами, профессиональным применением современных научных концепций анализа экспериментальных данных и посредством прямого сравнения экспериментальных и расчётных данных.

Диссертационная работа логично организована, материал изложен понятным и грамотным языком. Литературный обзор служит хорошим введением в последующее описание полученных научных результатов. Основные материалы диссертации изложены в пяти научных статьях, которые опубликованы в рецензируемых международных журналах.

В качестве замечаний-вопросов необходимо указать следующие:

1. По непонятным причинам в главе 2 "Экспериментальные и теоретические методы" обсуждается использованное оборудование только двух центров СИ (Elettra, MAXIV), тогда как описание также задействованных в работе установок центров Soleil, BESSYII и SLS представлено в главах, посвященных обсуждению полученных результатов.
2. В работе в явном виде отсутствуют результаты работы [1], посвященной исследованию h -BN/Co(0001), несмотря на то, что она позиционируется как диссертационное исследование. На стр. 106 приведено только следующее утверждение "Представленный подход был апробирован на примере анализа графеноподобной структуры h -BN/Co(0001) в работе [1] и будет использован при анализе всех ФД данных настоящей работы", что представляется недостаточным для диссертации.
3. На стр. 66 при описании свойств интерметаллидов РЗЭ утверждается, что "... 4f-орбитали расположены глубоко внутри ионного остова и потому не могут принимать непосредственное участие в образовании химической связи" и ниже "Взаимодействие 4f-состояний с делокализованными состояниями валентной зоны (spd) приводит к возникновению множества необычных явлений". О каком взаимодействии идет здесь речь, ведь валентная зона определяется не только РЗ атомами?
4. На стр. 67 без указания источника утверждается, что "Атомы почти всех РЗЭ (кроме La, Ce, Gd и Lu) в свободном состоянии имеют двухвалентную электронную конфигурацию $[Xe]4f^n(5d6s)^2$ ", тогда как справочная литература дает эту конфигурацию без 5d-электронов $-[Xe]4f^n6s^2$ (А.А. Радциг, Б.М. Смирнов. Справочник по атомной и молекулярной физике.–М.: Атомиздат, 1980).
5. При рассмотрении на стр.67 уравнения Эйнштейна для фотоэффекта утверждается, что "Екин = $h\nu - E_{св} - \Phi$ (2.1), где $E_{св}$ – это энергия связи возбуждаемого электрона, т.е. то отрицательное значение энергии, которое имеет электрон, находясь на определенном уровне (орбитали) атома," **Непонятно**, поскольку энергия связи – это работа по удалению электрона из определенной электронной оболочки атома и она всегда положительная.
6. На стр. 77 при рассмотрении зависимости сечения фотоионизации атома утверждается, что "Вблизи порога поглощения оно может сильно меняться из-за резонансного усиления, интерференции между непрямым каналом возбуждения (в котором участвует процесс оже-распада) и каналом прямой фотоэмиссии". **Это некорректно:** резонансное усиление наблюдается не в сечении фотоионизации, а в спектре валентной фотоэмиссии.

7. Довольно много технических и терминологических ошибок:

(i) в тексте (стр. 15) и в выражении (1.1) для фотоэлектронной интенсивности вектор поляризации \vec{E} указан как скаляр;

(ii) закон сохранения импульса (2.6) должен быть в векторной форме;

(iii) на стр. 78 и далее, для плоскости (зеркальной) симметрии используется выражение "плоскость зеркала";

(iv) при описании структуры диссертации (стр.13) не учитывается, что литературный обзор является одной из указанных четырех глав диссертации; и ряд других.

Сделанные замечания не затрагивают основные результаты и выводы диссертации и не сказываются на высокой оценке работы.

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,
профессор кафедры электроники твердого тела
физического факультета Санкт-Петербургского
государственного университета



Виноградов А.С.

3 февраля 2023 г.