

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.063.02,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ
ИМ. А.М. ПРОХОРОВА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, ПО
ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 28 октября 2019 г. № 124.

О присуждении АНДРЮШЕЧКИНУ БОРИСУ ВЛАДИМИРОВИЧУ,
гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора физико-
математических наук.

Диссертация «Структурные фазовые переходы на поверхности металлов при взаимодействии с галогенами», по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния принята к защите 20 мая 2019 г. (протокол заседания № 112) диссертационным советом Д-002.063.02, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук (ИОФ РАН), 119991 ГСП-1, Москва, ул. Вавилова, д. 38, совет создан приказом Рособнадзора № 2048–1308 19 октября 2007 г.

Соискатель Андрюшечкин Борис Владимирович, 1968 г. рождения. Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния «Локальная структура поверхности меди и серебра в реакции хлорирования» защитил в 2001 году в диссертационном совете Д-002.063.02, созданном на базе Института общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук (получен диплом кандидата наук КТ №061340 от 09 ноября 2001 г.). В настоящее время работает в Центре естественно-научных исследований Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН в должности заведующего лабораторией.

Диссертация выполнена в Отделе технологий и измерений атомного масштаба ЦЕНИ ИОФ РАН.

Официальные оппоненты:

Боронин Андрей Иванович, доктор химических наук, профессор, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук», отдел гетерогенного катализа, ведущий научный сотрудник;

Зайцев-Зотов Сергей Владимирович, доктор физико-математических наук, заместитель директора Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова Российской академии наук (ИРЭ РАН);

Кац Ефим Иосифович, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики твердого тела Российской академии наук (ИФТТ РАН), в своем положительном заключении, подписанном Аристовым Виктором Юрьевичем, доктором физико-математических наук, ведущим научным сотрудником Лаборатории спектроскопии поверхности полупроводников ИФТТ РАН, Ионовым Андреем Михайловичем, доктором физико-математических наук, ведущим научным сотрудником Лаборатории спектроскопии поверхности полупроводников ИФТТ РАН, Кведером Виталием Владимировичем, членом-корреспондентом РАН, доктором физико-математических наук, профессором, научным руководителем ИФТТ РАН, руководителем семинара «Физика дефектов», и утвержденный Директором ИФТТ РАН, доктором физико-математических наук Левченко Александром Алексеевичем, указала, что диссертация Андриюшечкина

Бориса Владимировича «Структурные фазовые переходы на поверхности металлов при взаимодействии с галогенами» являясь законченным научным исследованием, полностью удовлетворяет требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней ВАК РФ, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор, Андриюшечкин Борис Владимирович, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07-Физика конденсированного состояния.

Соискатель имеет 69 опубликованных статей в рецензируемых научных изданиях. По теме диссертации опубликовано 28 работ, из них 27 статей в рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК РФ и 1 глава в коллективной монографии.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации:

1. Andryushechkin B. V., Pavlova T. V., Eltsov K. N. Adsorption of halogens on metal surfaces // **Surface Science Reports**. 2018. Vol. 73. Pp. 83 – 115.
2. Cherkez V. V., Zheltov V. V., Didiot C., Kierren B., Fagot-Revurat Y., Malterre D., Andryushechkin B. V., Zhidomirov G. M., Eltsov K. N. Self-ordered nanoporous lattice formed by chlorine atoms on Au(111) // **Physical Review B**. 2016. Vol. 93. P. 045432.
3. Andryushechkin B. V., Cherkez V. V., Kierren B., Fagot-Revurat Y., Malterre D., Eltsov K. N. Commensurate-incommensurate phase transition in chlorine monolayer chemisorbed on Ag(111): direct observation of crowdions condensation into domain-wall fluid // **Physical Review B**. 2011. Vol. 84. P. 205422.
4. Andryushechkin B. V., Cherkez V. V., Gladchenko E. V., Zhidomirov G. M., Kierren B., Fagot-Revurat Y., Malterre D., Eltsov K. N. Structure of chlorine on Ag(111): Evidence of the (3×3) reconstruction // **Physical Review B**. 2010. Vol. 81. P. 205434.
5. Andryushechkin B. V., Zhidomirov G. M., Eltsov K. N., Hladchanka Y. V., Korlyukov A. Local structure of the Ag(100) surface reacting with molecular iodine: Experimental and theoretical study // **Physical Review B**. 2009. Vol.

80. P. 125409.

6. Andryushechkin B. V., Eltsov K. N., Shevlyuga V. M., Bardi U., Cortigiani B. Structural transitions in chemisorbed iodine layer on Cu(100) // **Surface Science**. 2002. Vol. 497. Pp. 59–69.
7. Andryushechkin B. V., Eltsov K. N., Shevlyuga V. M. Domain-wall mechanism of “ $(n\sqrt{3}\times n\sqrt{3})R30^\circ$ ” incommensurate structure formation in chemisorbed halogen layers on Cu(111)) // **Surface Science**. 2000. Vol. 470. Pp. L63–L67.

На автореферат диссертации поступило четыре отзыва:

1. Из Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет» (г. Уфа, Республика Башкортостан), подписанный доктором физико-математических наук, профессором Бахтихиным Рауфом Загидовичем. Отзыв положительный, замечания отсутствуют.
2. Из Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики Российской академии наук» (г. Нижний Новгород), подписанный ведущим научным сотрудником отдела физики магнитных наноструктур, доктором физико-математических наук Мироновым Виктором Леонидовичем. Отзыв положительный, содержит два замечания: 1) не объяснено, как вычислялась энергия парного взаимодействия Cl на поверхности Au (стр. 10). Кроме того, нет обсуждения эффекта смены знака энергии взаимодействия (рис. 2) и перегиба на зависимости энергии от расстояния Cl в области 0,6 нм. Механизм упругого взаимодействия атомов через подложку требует пояснений. 2) отсутствуют ссылки на работы автора, что затрудняет понимание насколько полно опубликован каждый из основных результатов работы.
3. Из Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт автоматизации и процессов управления Дальневосточного отделения

Российской академии наук» (г. Владивосток), подписанный главным научным сотрудником Лаборатории «Технологии полупроводников и диэлектриков», доктором физико-математических наук Грузневым Дмитрием Вячеславовичем. Отзыв положительный, содержит одно небольшое замечание: в автореферате для некоторых систем не приводятся структурные модели, а атомное устройство соответствующих поверхностей обсуждается текстом, что несколько затрудняет анализ работы.

4. Из Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южный федеральный университет» (г. Ростов–на–Дону), подписанный заведующим кафедрой теоретической и вычислительной физики, доктором физико-математических наук Бугаевым Лусегеном Арменаковичем. Отзыв положительный, содержит два замечания: 1) в автореферате отсутствует описание хотя бы основных моментов ТФП расчетов – информации, важной для понимания правильности выполненного сопоставления экспериментальных данных и предлагаемых атомных структур. В частности, важным фактором при ТФП расчетах несоразмерных структур на поверхности, является размер выбранной ячейки, которой, в идеале, должен быть кратен как размеру ячейки кристалла подложки, так и адсорбанта. Не указан использованный обменный функционал, поскольку функционалы LDA или PBE известны своим переоцениванием или недооцениванием получаемых межатомных расстояний. 2) при сопоставлении экспериментальных STM изображений с моделями атомных структур, желательно было бы выполнить ТФП–расчет STM с учетом приложенной разности потенциалов и сравнивать уже их с экспериментом. Такой расчет не требует существенных затрат машинного времени, но может указать на детали атомной структуры, такие как глубина залегания атомов адсорбантов и рельеф поверхности.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что официальные оппоненты и сотрудники ведущей организации широко известны своими достижениями в областях физики поверхности,

физики фазовых переходов и низкоразмерных систем, являющихся неотъемлемой частью физики конденсированного состояния, и способны всесторонне оценить научную и практическую значимость рассматриваемой в диссертации проблемы.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

установлено, что механизм фазового перехода «соразмерная-несоразмерная фаза», включающий в себя формирование краудионов и их конденсацию в сверхплотные линейные доменные стенки, может быть общим и определять фазовые переходы в слое галогенов на гранях (111) г.ц.к. металлов;

доказано, что модель линейных доменных стенок описывает процесс сжатия решетки галогенов на грани (110) г.ц.к. металлов в том случае, если предпочтительным местом адсорбции галогена является положение между четырьмя атомами подложки. При реализации короткого мостикового положения сжатие решетки галогена происходит в результате реконструкционных переходов;

доказано, что на грани (100) г.ц.к. металлов сжатие соразмерной решетки галогенов реализуется только при значительном превышении расстояния галоген-галоген в исходной соразмерной структуре над диаметром Ван-дер-Ваальса галогена (случай I/Cu(100)) и происходит за счет серии фазовых переходов первого и второго рода, включая 2D плавление;

установлена атомная структура поверхности Ag(111) в реакции хлорирования, в частности, предложена и теоретически обоснована модель реконструкции (3×3);

установлено, что после формирования хемосорбированного слоя галогенов, для ряда систем галоген/металл происходит формирование поверхностных галогенидов, структура и стехиометрия которых отличается от соответствующих объемных соединений;

показано, что структуры, формируемые атомами галогенов на поверхности г.ц.к. металлов на субмонослойной стадии адсорбции, обусловлены

непрямыми взаимодействиями между атомами галогенов через подложку.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что обнаруженные структурные превращения в слоях галогенов, адсорбированных на различных монокристаллических гранях серебра, золота и меди, представляют интерес для физики фазовых переходов, поскольку детальная информация на атомном уровне может являться экспериментальной основой для разработки новых теоретических подходов.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

определены и идентифицированы все поверхностные фазы, формируемые хлором на грани серебра (111), что является крайне важным в установлении механизмов промышленной реакции эпоксидирования этилена на серебряном катализаторе, в которой хлорсодержащие молекулы являются промолутерами.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

экспериментальные результаты получены с применением современных методов подготовки и исследования двумерных поверхностных структур в контролируемых условиях сверхвысокого вакуума; использовано самое современное научное оборудование, позволяющее изучать структуру поверхности с атомарным разрешением; выполнено сопоставление данных, полученных различными взаимодополняющими методами анализа поверхности; экспериментальные данные согласуются с результатами расчетов из первых принципов, а также с результатами, полученными другими научными группами.

Личный вклад соискателя состоит в определении направления и разработке детального плана исследований, представленных в диссертации, в получении, обработке и интерпретации экспериментальных данных, в создании структурных моделей для теоретических расчетов, в создании ключевых элементов экспериментального оборудования и разработке программного обеспечения для автоматизации эксперимента, в подготовке

всех публикаций по выполненной работе, в представлении результатов исследования на конференциях и семинарах.

На заседании 28 октября 2019 г. диссертационный совет принял решение присудить Андриюшечкину Б.В. ученую степень доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 7 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 24 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 20, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель диссертационного совета,
Член-корреспондент РАН



С.В. ГАРНОВ

И.О.ученого секретаря,
доктор физ.– мат. наук:

В.В. ГЛУШКОВ

« 31 » ноября 2019 г.