

## О Т З Ы В

**официального оппонента на диссертационную работу Комарова Никиты Сергеевича «Атомные структуры на поверхности монокристаллов никеля при воздействии молекулярного йода», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния**

Диссертационная работа Комарова Никиты Сергеевича посвящена детальному изучению структур, формирующихся на поверхности монокристаллов никеля при взаимодействии с молекулярным йодом. С одной стороны, эта работа является частью сравнительно большой области исследований, посвящённых взаимодействию галогенов с поверхностью металлов. С другой стороны, эта работа имеет отношение к набирающей популярность тематике создания двумерных систем, в которых наблюдается широкий круг разнообразных физических явлений, включая сверхпроводимость, образование волн зарядовой плотности и появление магнитных свойств. При этом технологический подход, реализуемый в настоящей работе, является масштабируемым, в отличие от подходов, связанных с использованием «скотч-технологии». Актуальность проведённых исследований взаимодействия галогенов с магнитными материалами связана также с перспективами использования двумерных магнетиков для создания устройств спинтроники. Работы по изучению взаимодействия молекулярного йода с поверхностью никеля проводились и ранее, но они были ограничены лишь изучением взаимодействия с поверхностью Ni(100), в то время как процессы взаимодействия с поверхностями Ni(111) и Ni(110) в условиях сверхвысокого вакуума оставались неизученными. Методы исследований, использованные диссертантом и включающие в себя изучение поверхности *in situ* методами электронной оже-спектроскопии, дифракции медленных электронов и сканирующей туннельной микроскопии в условиях сверхвысокого вакуума, относятся к области высоких технологий и являются наиболее совершенными и адекватными поставленной задаче. Достоинством работы является сопоставление результатов экспериментальных исследований с результатами первопринципных расчётов в рамках теории функционала плотности.

Содержание диссертационной работы изложено на 167 страницах. Диссертация состоит из введения, обзора литературы, четырёх глав, заключения и библиографии. Диссертация включает 68 рисунков, 5 таблиц и список литературы из 193 наименований.

Результаты исследований, представленных в диссертации, опубликованы в трёх статьях и четырёх трудах международных симпозиумов.

Во введении обоснована актуальность исследования, описана степень проработки темы, указаны цели и задачи диссертационной работы, научная новизна, теоретическая и практическая значимость полученных результатов, кратко описаны методология и методы исследований, приведены положения, выносимые на защиту, и обоснование достоверности полученных результатов, описаны апробация результатов и личный вклад автора, а также дана информация о структуре и объёме диссертации и приведен список публикаций по теме диссертации.

В первой главе диссертации объёмом 36 страниц дан подробный обзор литературы по взаимодействию галогенов с монокристаллическими гранями никеля в условиях сверхвысокого вакуума. Начинается обзор с описания общих закономерностей взаимодействия галогенов с поверхностями г.д.к. металлов. Далее представлен обзор литературы по адсорбции галогенов на грани монокристалла никеля различной ориентации. В отдельный раздел выделен обзор литературы по бинарным галогенидам переходных металлов, в ряде которых проявляется низкоразмерный магнетизм. Представлен также обзор литературы по структурным фазовым переходам в двумерных слоях на поверхности кристаллов. В заключительном разделе обосновывается выбор объектов исследования.

Во второй главе подробно описаны использованные методы исследований. Детально рассмотрены экспериментальные сверхвысоковакуумные установки, физические принципы электронной оже-спектроскопии, дифракции медленных электронов, сканирующей туннельной микроскопии, а также методы подготовки поверхности. Все экспериментальные методы реализованы *in situ* в едином вакуумном объёме, что является несомненным достоинством данной работы. В отдельном разделе главы описаны методы первопринципных расчётов, которыми дополняется обсуждение практически всех экспериментальных результатов.

Результаты проведённых исследований изложены в последующих трёх главах. Все результаты оригинальны, автор демонстрирует владение всеми описанными в диссертации методами экспериментальных исследований и анализа экспериментальных данных, а также знание и понимание физики изучаемых систем. Оппонент хотел бы отметить высокое качество исходных данных, прежде всего результатов изучения поверхности методами сканирующей туннельной микроскопии — практически все основные изображения исследуемых поверхностей получены с атомным разрешением без каких-либо лишних шумов, а в ряде случаев с подробностями, которые были пропущены предыдущими

исследователями, если подобные измерения проводились ранее. Во всех главах экспериментальные результаты сопоставляются с результатами первопринципных расчётов.

В главе 3 представлены результаты изучения системы I/Ni(111). Основные результаты здесь — это наблюдение и описание всех последовательных стадий адсорбции йода и расшифровка возникающих при этом структур. Также диссертанту удалось наблюдать зародышеобразование островков NiI<sub>2</sub>.

Глава 4 посвящена результатам исследований структурных фазовых переходов из соразмерной в несоизмерную фазу в монослое йода в системе I/Ni(110), а также процесса роста тонкой плёнки йодида никеля на этой грани. Изучены и описаны последовательные стадии адсорбции йода на поверхность Ni(110): формирование соразмерной решётки c(2x2), формирование двумерных дефектов внедрения (краудионов), зарождение и рост петлевых доменных стенок и их трансформация в линейную структуру. Обнаружено искажение решётки верхнего слоя йодида никеля по сравнению с объёмной решёткой кристалла NiI<sub>2</sub>.

В главе 5 описаны результаты исследований структурных фазовых переходов в монослое йода, хемисорбированном на монокристаллическую грань Ni(100), а также роста тонкой плёнки NiI<sub>2</sub> на этой грани. В отличие от исследований, результаты которых изложены в предыдущих главах, исследования, представленные в этой главе, выполнены при двух температурах - при 390 К и комнатной. Это существенно увеличило разнообразие структур, возникающих в процессе хемисорбции йода. Диссертанту удалось идентифицировать все наблюдаемые структуры, а также изучить структуру плёнки NiI<sub>2</sub>, вырастающей на этой грани. При этом оказалось, что при комнатной температуре формирование островков йодида никеля происходит послойно, причем островки имеют фрактально-дендритную форму, свидетельствующую об ограниченной диффузии атомов йода и никеля на поверхности Ni(100). В итоге, и для этой грани получена полная картина явлений, возникающих при хемисорбции йода. Как и в предыдущих главах, идентификация наблюдающихся структур проводилась с помощью сопоставления с результатами подробных первопринципных расчётов. Следует отметить, что результаты, полученные для грани Ni(100), свидетельствуют, что фазовая диаграмма на этой поверхности является одной из самых сложных для систем галоген/металл, и её успешное изучение является свидетельством высокой квалификации диссертанта.

В Заключение подведены итоги проведённых исследований и сформулированы основные полученные результаты.

Таким образом, в диссертации представлена исчерпывающая информация о структурах, возникающих при хемисорбции йода на трёх базовых гранях никеля, а также об

особенностях возникновения монокристаллических плёнок йодида никеля. По материалам диссертации опубликовано 7 работ, в том числе три в ведущих международных журналах Surface Science, Physical Chemistry Chemical Physics и Journal of Physical Chemistry C.

Замечания:

1. При описании методики подготовки чистой поверхности (стр. 60 диссертации) диссертант указывает лишь энергию ионов и время травления, а плотность тока, которой пропорциональна скорость травления, не указывает.

2. На рис. 3.1 представлена зависимость интенсивности оже-линий йода от времени адсорбции йода и приведена плавная кривая, описывающая эту зависимость. Никаких пояснений, как эта плавная зависимость получена, в диссертации нет. При описании рисунка делается вывод, что при увеличении степени покрытия йода выше 0,27 происходит изменение наклона, в то время как аппроксимирующая кривая является плавной и не содержит точек перегиба.

3. В таблице 3.1 представлены результаты первопринципных расчётов энергии адсорбции атома йода при его различных адсорбционных положениях. Видно, что различие между г.ц.к. и г.п.у. положениями составляет 11 мэВ. Эта величина более чем в два раза меньше температуры, при которой проводятся измерения. В диссертации отсутствует обсуждение как точности вычислений, так и практической значимости данного различия.

4. В диссертации приведено множество СТМ-изображений островков йодида никеля, однако ни в одном случае не приведены профили или гистограммы высот этих островков, наличие которых позволило бы оценить надёжность предложенной интерпретации результатов. Следует, например, ожидать, что величина искажения решетки йодида никеля на поверхности Si(110) зависит от высоты островков.

5. На рис 4.12 приведены СТМ-изображения островков йодида никеля, на которых отчётливо видны хаотически расположенные тёмные и светлые пятна. Это наблюдение интерпретируется как отщепление слоя йодида никеля. Сценарии интеркаляции не обсуждаются. Оппонент не исключает, что сценарий появления таких областей связан с проникновением йода между слоем йодида никеля и никелем.

Диссертация написана ясным языком, свидетельствующим о понимании диссертантом сути дела. У оппонента единственное замечание по стилю изложения: при описании методов функционала плотности на стр. 64 имеется загадочная фраза, смысла которой оппонент не смог уловить «Преимуществом теории функционала плотности является описание состояния системы путём задания трёх пространственных координат  $n(x,y,z)$ ».

Все указанные замечания носят непринципиальный характер и не влияют на положительную оценку диссертации. Считаю, что содержание работы Комарова Никиты Сергеевича и форма её представления полностью соответствует требованиям «Положения о порядке присуждения учёных степеней» ВАК Минобрнауки России, а автор достоин присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Автореферат и опубликованные работы полностью и точно отражают содержание диссертации.

Официальный оппонент,  
зам. директора ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН  
доктор физ.-мат. наук

С.В. Зайцев-Зотов

ФГБУН Институт радиотехники и радиоэлектроники им. В.А. Котельникова РАН, 125009, Москва, ул. Моховая 11, корп.7, e-mail: [serzz@cplire.ru](mailto:serzz@cplire.ru), тел.: (495) 629 34 47.

Подпись С.В. Зайцева-Зотова заверяю  
Ученый секретарь Института

И.И. Чусов

31 мая 2021 г.

