

официального оппонента Орешкина Андрея Ивановича

на диссертационную работу Комарова Никиты Сергеевича

«Атомные структуры на поверхности монокристаллов никеля при воздействии

молекулярного йода», представляющую на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Повышенный интерес исследователей к структурам пониженной размерности обусловлен возможностью их использования в твердотельной электронике с целью создания новых перспективных устройств нанoeлектроники и спинтроники. Поиск новых двумерных магнитных материалов стимулировал недавно открытие собственного ферромагнетизма монослоя CrI₃. Прогресс в этой области может быть обеспечен только в результате комплексного и многостороннего исследования структуры и свойств объектов нанометрового масштаба. В связи с тем, что многие известные магнитные двумерные материалы являются галогенидами переходных металлов (CrI₃, CrBr₃, NiX₂, X = Cl, Br, I), актуальность темы рассматриваемой диссертационной работы не вызывает сомнений.

Диссертация состоит из введения, обзора литературы, 4 глав, заключения и библиографии. Общий объем диссертации 167 страниц включая 68 рисунков и 5 таблиц. Библиография включает в себя 193 наименования. Во **Введении** сформулированы цели работы, обоснована ее актуальность, определена степень разработанности темы исследования и указаны применяемые в работе методы, показаны новизна и практическая важность полученных результатов, приведены положения, выносимые на защиту, сведения об апробации результатов и список работ, в которых опубликованы основные результаты диссертации. В **Заключении** представлены основные результаты диссертационной работы. Кроме того, в конце глав №3, №4, №5 диссертации даны краткие выводы, подытоживающие описанные в них исследования.

В **первой главе** диссертации представлен краткий, но достаточно полный литературный обзор, в котором разъясняются поставленная задача работы и выбор объектов исследований. В первом параграфе детально описаны общие закономерности взаимодействия галогенов с поверхностями металлов, имеющих границиентрированную кубическую структуру. Во втором параграфе главы №1 рассмотрена адсорбция галогенов на монокристаллические грани никеля. В третьем параграфе приведена информация о структурах фазовых переходов в двумерных системах.

Вторая глава диссертации содержит подробное изложение использованных экспериментальных методов, установок и методик. Изучение элементного состава поверхности проводилось методом электронной спектроскопии (ЭОС), а изучение структуры поверхности — методами дифракции медленных электронов (ДМЭ) и сканирующей туннельной микроскопии (СТМ). Дано детальное описание сверхвысоковакуумных систем, на которых проводились исследования. Подробно

описаны физические принципы действия каждого используемого метода. Особое внимание обращено на используемые в эксперименте образцы и методику приготовления атомо-гладкой чистой поверхности. В отделе параграф главы расмотрены теоретические методы исследования, применяемые в данной работе. В частности, подробно описаны основные положения теории функцииюнала электроной плотности.

В третьей главе описаны исследования процессов и структуры, образующихся при нанесении молекулярного йода на поверхность Ni(111). Экспериментально установлено, что на первой стадии адсорбции йода на поверхности Ni(111) формируется соразмерная решетка $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$, соответствующая степени покрытия 0.33 монослоя. Было показано, что сжатие соразмерной решетки $(\sqrt{3} \times \sqrt{3})R30^\circ$ на поверхности Ni(111), наблюдаемое при увеличении степени покрытия йода, происходит за счет формирования сверхплотных доменных стенок. На начальном этапе сжатия доменные стенки оказываются замкнуты в петли, однако, при последующем увеличении степени покрытия йода сверхплотные доменные стенки упорядочиваются в линейные структуры. Насыщенный слой йода описывается решеткой $(11 \times \sqrt{3}R30^\circ)$. Было показано, что рост пленки йода никеля на поверхности Ni(111) начинается только после завершения формирования насыщенного монослоя йода, а основными центрами зародышеобразования островков Ni₂ являются края атомных ступеней. Последующая адсорбция йода приводит к агломерации островков йода никеля и образованию сплошной пленки йода никеля. Установлено, что неупорядоченная в эксперименте молекулярная связанная коллца возникает вследствие частичного отщепления слоя йода никеля от подложки.

Четвертая глава посвящена результатам исследований структурных фазовых переходов из соразмерной в несооразмерную фазу в монослое йода, хемосорбированном на монокристаллическую грань Ni(110), а также процесса роста тонкой пленки йода никеля. В этих исследованиях были следующие основные результаты. Экспериментально установлено, что на первой стадии адсорбции йода на поверхности Ni(110) формируется соразмерная решетка (2×2) , соответствующая степени покрытия в 0.5 монослоя.

Показано, что адсорбция йода на структуру (2×2) приводит к формированию двумерных дефектов внедрения (крайдионов) и к последующему зарождению и росту петлевых доменных стенок, которые в дальнейшем трансформируются в линейную структуру. Насыщенный слой йода описывается частично-соразмерной решеткой (74×2) . Установлено, что рост пленки йода никеля на поверхности Ni(110) начинается только после завершения формирования насыщенного монослоя йода. Экспериментально показано, что основными центрами зародышеобразования островков Ni₂ являются границы атомных ступеней. Последующая адсорбция йода приводит к агломерации островков йода никеля и образованию сплошной пленки йода никеля.

Установлено, что поверхность островка йода никеля описывается квази-текагональной структурой с параметрами решетки равными 4.09 \AA , 3.89 \AA и 3.89 \AA . Помимо атомной молекулярной, на поверхности островка йода никеля наблюдаются сверхструктура муара,

появление которой обусловлено расщеплением атомных решеток йодида никеля и насыщенный монослой йода со структурой $c(74 \times 2)$, и неупорядоченная молекулярная, возникающая в результате частичного отщепления слоя йодида никеля от подложки.

В пятой главе представлены результаты исследования структурных фазовых переходов в монослой йода, хемосорбированном на монокристаллическую грань $Ni(100)$, а также процесса роста тонкой пленки йодида никеля. Экспериментально установлено, что фаза $c(2 \times 2)$ не образуется на поверхности $Ni(100)$. Согласно ТФП-расчетам, атомы йода в большинстве хемосорбированных структур (кроме $p(2 \times 2)$) занимают различные адсорбционные центры в элементарной ячейке. Адсорбция йода при комнатной температуре (300 К) приводит к формированию на поверхности метастабильных фаз $c(6 \times 2)$, $(\sqrt{10} \times \sqrt{10})R18^\circ$, а адсорбция йода при повышенной температуре (390 К) — к формированию равновесных структур $c(3 \times 2)$, $c(5 \times 2)$.

Впервые в системах галоген/металл обнаружена реконструкция типа «смещенный ряд», вызванная воздействием молекулярного йода на поверхность $Ni(100)$. Поверхность островка йодида никеля описывается квазигексагональной структурой с параметрами решетки равными: 3.91 Å, 3.91 Å, 3.79 Å. Установлена возможность частичного отщепления слоя йодида никеля от подложки. Подытоживая сказанное выше, следует заключить, что автором получен целый ряд новых значимых результатов. Их достоверность и обоснованность, также как и обоснованность основных положений, выносимых на защиту, не вызывают сомнений.

Вместе с тем, следует высказать несколько замечаний.

1. В работе присущает достаточно большое количество опечаток, в частности, в разделе, где обсуждаются локальные задачи для достижения поставленной цели работы. Фактически есть в каждой главе и присущают даже в основных выводах к Главе 4.
2. На странице 27: В этих соединениях, CdI_2 и $CdCl_2$, октаэдрически координированный двух-валентный никель имеет электронную конфигурацию $3d^8$ с заполненными t_{2g} и наполовину заполненными e_g орбиталями. Отсутствует ссылка на работу, в которой представлена данная информация.
3. На странице 36 в формуле (1.1) допущена ошибка. Слагаемое $1/2K(x_n+1 - x_n - a)$ должно быть в квадрате: $1/2K(x_n+1 - x_n - a)^2$
4. Формула (1.4), по всей видимости, написана не верно.
5. В уравнении (1.7) согласно принятым ранее обозначениям, вместо V должно фигурировать V_0 .
6. На странице 44 в формулах (1.8), (1.9), (1.10) встречаются обозначения, не расшифрованные в тексте. При рассмотрении одноочной дислокации не указано какого типа дислокацию (винтовую, краевую) рассматривал автор.
7. В тексте диссертации сказано о наличии в структуре $c(2 \times 2)$ на поверхности $Ni(110)$ объектов двух типов: линейного (свободного) крайлона и связанного крайлона.

Сказано, что свободный крайлоном не был обнаружен на СТМ-изображениях ввиду

его высокой подвижности при комнатной температуре. Почему, имея в лаборатории низкотемпературный сканирующий туннельный микроскоп, не были проведены эксперименты в этом направлении?

8. В параграфе 5.1.3 на странице 111 степень покрытия поверхности $Ni(100)$ йодом определена с точностью до третьего знака. Это же касается и параметра расширения Q . В этой связи хотелось бы спросить диссертанта о величине реальной экспериментальной ошибки для определения этих величин.

Выказанные замечания носят частный характер и не могут повлиять на общую, очень высокую оценку диссертационной работы. Диссертация Н.С. Комарова является законченной научно-квалификационной работой. Результаты работы опубликованы в высоко рейтинговых отечественных и зарубежных журналах, а также в трудах и тезисах ряда конференций.

Диссертация правильно отражает содержание опубликованных работ, а авторферат точно и полно – содержание диссертации.

Диссертационная работа Комарова Никиты Сергеевича удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а ее автор, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния».

Сведения об оппоненте:

ФИО: Орешкин Андрей Иванович

Ученая степень: доктор физико-математических наук

Специальность: 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния»

Почтовый адрес: 11991 ГСП-1, Москва, Ленинские горы, МГУ имени М.В.

Ломоносова, дом 1, строение 2, Физический факультет

Телефон: +7(495) 939-25-02

Адрес электронной почты: oreshkin@smlab.phys.msu.ru

Наименование организации: Федеральное государственное бюджетное образовательное

учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени

М.В.Ломоносова» Физический факультет

Должность: ведущий научный сотрудник

Официальный оппонент:

д.ф.-м.н.,

ведущий научный сотрудник
МГУ имени М.В. Ломоносова

2 июня 2021 г.

Декан физического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова

профессор



[Handwritten signature]

Сысоев Н.Н.

А.И. Орешкин