

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.228.01,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО НАУЧНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ «ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КРАСНОЯРСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК» (ФИЦ
КНЦ СО РАН, КНЦ СО РАН), ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 04.02.2022 г. № 1

о присуждении Бегунович Людмиле Витальевне,

гражданке Российской Федерации,

ученой степени кандидата физико-математических наук

Диссертация «Структура и свойства соединений VTe_2 /графен, VTe_2 /графен/ VTe_2 , $FeSe/Se/SrTiO_3$ и допированных атомами металлов тетраоксо[8]циркуленов» по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния принята к защите 19.11.2021 г. (протокол заседания № 11) диссертационным советом 24.1.228.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН), 660036, Красноярск, Академгородок, д. 50, приказ Минобрнауки № 1513/нк от 25.11.2016.

Соискатель Бегунович Людмила Витальевна, 18 июля 1990 года рождения, в 2013 г. окончила Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Сибирский федеральный университет», выдавшее диплом по специальности 020101.65 «Химия». В 2019 году окончила очную аспирантуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования

«Сибирский федеральный университет», по направлению подготовки 02.00.04 «Физическая химия». В 2020 году была зачислена в качестве экстер-на в Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Сибирский федеральный университет» с 20.04.2020 г. по 19.10.2020 г для сдачи кандидатских экзаменов по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния». Работает младшим научным сотрудником Департамента науки и инновационной деятельности (тема ГЗ-18) Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Сибирский федеральный университет».

Диссертация выполнена в лаборатории Физики магнитных явлений Института физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленном подразделении ФИЦ КНЦ СО РАН.

Научный руководитель – *Коришунов Максим Михайлович*, доктор физико-математических наук, доцент, Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, ведущий научный сотрудник лаборатории Физики магнитных явлений.

Официальные оппоненты:

Некрасов Игорь Александрович, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук, ведущий научный сотрудник,

Пономарев Александр Николаевич, кандидат физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук, заведующий лабораторией молекулярного имиджинга и фотоакустики – дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследова-

тельский технологический университет "МИСиС"», г. Москва, в своем положительном отзыве, подписанном доктором физико-математических наук, ведущим научным сотрудником Научно-исследовательской лаборатории «Неорганические наноматериалы», Сорокиным Павлом Борисовичем, указала, что диссертационная работа представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, описывающую оригинальное и самостоятельное исследование, полученные в работе результаты являются новыми, представляют научную и практическую значимость для дальнейшего теоретического и экспериментального изучения двумерных электронных систем.

Соискатель имеет 27 опубликованных работ, в том числе 9 работ по теме диссертации, 3 из которых опубликованы в рецензируемых научных изданиях:

1. Begunovich, L.V. Single-layer polymeric tetraoxa[8]circulene modified by s-metals: toward stable spin qubits and novel superconductors / L.V. Begunovich, A. Kuklin, G. Baryshnikov, R.R. Valiev, H. Ågren // *Nanoscale*. – 2021. – Vol. 13. – P. 4799–4811.

2. Tikhonova (Begunovich), L.V. Effect of the additional Se layer on the electronic structure of iron-based superconductor FeSe/SrTiO₃ / L.V. Tikhonova (Begunovich), M.M. Korshunov // *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*. – 2020. – Vol. 33. – P. 171–176.

3. Begunovich, L.V. Triple VTe₂/graphene/VTe₂ heterostructures as perspective magnetic tunnel junctions / L.V. Begunovich, A.V. Kuklin, M.A. Visotin, A.A. Kuzubov, F.N. Tomilin, A.S. Tarasov, Y.G. Mikhalev, P.V. Avramov // *Applied Surface Science*. – 2020. – Vol. 510. – P. 145315.

4. Бегунович, Л.В. Влияние дополнительного слоя селена на электронную структуру FeSe/SrTiO₃ / Л.В. Бегунович, М.М. Коршунов // Сборник тезисов докладов XIII Сибирского семинара по высокотемпературной сверхпроводимости и физике наноструктур ОКНО-2021. – Новосибирск: ИНХ СО РАН. – 2021. – P. 46.

5. Бегунович, Л.В. Двумерные металлоорганические полимеры на основе тетраоксо[8]циркулена и атомов s-металлов / Л.В. Бегунович // Тезисы докладов Междисциплинарной конференции молодых учёных ФИЦ КНЦ СО РАН (КМУ-XXIV). – Красноярск: ИФ СО РАН. – 2021. – Р. 14.

6. Begunovich, L.V. 2D organometallic polymers based on tetraoxa[8]-circulene and s-metal atoms / L.V. Begunovich, A.V. Kuklin, G.V. Baryshnikov, R.R. Valiev, H. Ågren // Book of abstracts of Mendeleev 2021, XII International Conference on Chemistry for Young Scientists. – Saint Petersburg: St Petersburg University. – 2021. – P. 121.

7. Tikhonova (Begunovich), L.V. VTe₂/graphene and VTe₂/graphene/VTe₂ heterostructures for spintronic applications / L.V. Tikhonova (Begunovich), Y.G. Mikhalev // Ab initio modeling of advanced materials (AMM-2019). – Ekaterinburg. – 2019. – P. 32.

8. Tikhonova (Begunovich), L.V. Nanoscale magnetic tunnel junction / L.V. Tikhonova (Begunovich) // International Union of Materials Research Societies – International Conference on Electronic Materials 2018. – Daejeon. – 2018.

9. Tikhonova (Begunovich), L.V. New perspective magnetic tunnel junctions / L.V. Tikhonova (Begunovich), A.A. Kuzubov // Сборник тезисов докладов X Международной конференции молодых учёных по химии «Менделеев-2017». – Санкт-Петербург. – 2017. – Р. 392.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы (все положительные):

Ведущая организация (ФГАОУ ВО «НИТУ "МИСиС"»). Отзыв положительный. Замечания: **1)** В главе 2 в методах моделирования (п. 2.1) указано, что «для учёта сил Ван-дер-Ваальса в слоистых гетероструктурах использовалась эмпирическая D2 поправка Гримма», однако не приведена информация о тестировании данного метода. Это важный момент, поскольку подход Гримма является эмпирическим и, таким образом, его использование для новых систем требует оценки применимости. **2)** Найденные расстояния между графеном и VTe₂ существенно зависят от типа фазы (для Т- и Н-фазы по-

лученные значения межслоевого расстояния составляют 3.55 и 3.42 Å, соответственно, см. табл. 2.3). С чем связано данное различие? Не является ли это артефактом расчёта, связанного с использованием эмпирической поправки Гримма? 3) С чем связано такое сильное изменение электронной структуры VTe_2 и графена при их соединении в гетероструктуру (см. Рис. 2.6)? Взаимодействие между слоями крайне мало, и оно не должно было привести к такому сильному искажению плотностей электронных состояний. 4) Графики плотности электронных состояний (Рис 2.6с,d) и зонной структуры (Рис. 2.9а,b) для $\text{H-VTe}_2/\text{графен}$ и $\text{T-VTe}_2/\text{графен}$ противоречат друг другу, поскольку из плотности электронных состояний (чёрная линия) видно, что дираковский конус сильно искажён, в то время как в зонной структуре он сохраняет свою структуру. С чем связано это противоречие? Нет ли здесь ошибки в плотности электронных состояний? 5) С чем связана физическая причина присутствия плоских зон в электронной структуре системы Са-тетраоксо[8]циркулена и их отсутствие в системах Li-тетраоксо[8]циркулена и Na-тетраоксо[8]циркулена (Рис 4.4)? 6) На рис. 4.4а-с зоны в крайней правой точке ошибочно названы точкой Г.

Д.ф.-м.н., член-корреспондент РАН, Некрасов Игорь Александрович – официальный оппонент. Отзыв положительный. Замечания: 1) В разделе 4.2 описаны результаты расчётов критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние T_c , однако, в отличие от других разделов, не описаны подробности расчёта и не приведены формулы для вычисления T_c . 2) В то время как в диссертации сделан вывод о энергетической стабильности ТОС#2-Са по сравнению с ТОС#1-Са, недоумение вызывает тот факт, что для исследования сверхпроводимости выбран именно ТОС#1-Са, а не ТОС#2-Са. 3) Подписи на рисунках 1.3, 1.4, 2.3, 2.4, 2.6-2.12, 2.15, 2.16, 3.1-3.3, 3.5, 3.6, 4.3-4.8, выполнены на английском языке. К тому же нет единообразия в обозначениях единиц измерения при обозначении осей графиков: в некоторых случаях они заключены в скобки, в некоторых – приведены через запятую.

К.ф.-м.н., Пономарев Александр Николаевич – официальный оппонент.

Отзыв положительный. Замечания: 1) Во введении пространно прописана актуальность исследования слоистых соединений, без указания видов 2D слоистых материалов. 2) На стр. 11 главы 1 не подкреплены ссылками высказывания «Ценным источником разнообразных 2D структур являются слоистые материалы» и «Использование слоистых материалов в качестве источника 2D структур позволяет создавать новые материалы для разных практических приложений», что затрудняет восприятие. 3) Ссылки на схемы указаны в описании рисунков, но не в тексте работы, что также затрудняет восприятие. 4) В главе 2 рассчитана трёхслойная гетероструктура $\text{VTe}_2/\text{графен}/\text{VTe}_2$ в которой, согласно рисунку 2.14, отсутствует искажение графенового слоя, который остается идеально двумерным, что, вероятно, не соответствует действительности.

К.ф.-м.н., Попов Захар Иванович. Отзыв положительный. Замечания:

1) К рис. 5 отсутствует описание «а, б, в, г», из-за этого в тексте при ссылке на рис. 5 возникает путаница. 2) При описании гетероструктур VTe_2 с графеном было бы полезно привести параметры деформации относительно изолированных монослоев графена и VTe_2 .

К.ф.-м.н., Шорилов Алексей Олегович. Отзыв положительный. Замечания: 1) Неясно, какой конкретно функционал (PBE или гибридный) использовался в каждом случае; почему при исследовании гетероструктур VTe_2 на поверхности графена и $\text{FeSe}/\text{Se}/\text{SrTiO}_3$ не были использованы методы DFT+U или DFT+DMFT, которые более точно описывают поведение электронов в узких зонах, и которые успешно применяются для исследования сверхпроводников на основе железа и других соединений d-металлов?

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается соответствием направлений научных исследований, выполняемых оппонентами и реализуемых в ведущей организации, тематике представленной диссертационной работы, наличием публикаций и высоких достижений в соответствующей области исследований.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

1. Для двухслойных VTe_2 /графен и трёхслойных VTe_2 /графен/ VTe_2 гетероструктур рассчитаны структурные параметры, значения магнитных моментов на атомах, энергии магнитной анизотропии, энергии связи слоёв, спиновая поляризация, значение туннельного магнетосопротивления. Установлено, что взаимодействие между монослоями VTe_2 и графена способствует переходу в состояние спинового полуметалла, появлению оси лёгкого намагничивания в $T\text{-VTe}_2$, увеличению ширины запрещённой зоны в $H\text{-VTe}_2$, появлению дырочного допирования и расщеплению конуса Дирака в графене.

2. Описано влияние слоя селена на электронную структуру и перенос заряда в системе $\text{FeSe}/\text{SrTiO}_3$. Установлено, что заряд переходит с подложки на монослой FeSe . В присутствии вакансий кислорода атом Se локализует на себе заряд, препятствуя его переносу на FeSe .

3. Для металлоорганических полимеров на основе тетраоксо[8]циркулена и атомов Li, Na и Ca определены энергетически предпочтительные конфигурации, получены геометрические параметры, заряды на атомах, значения энергии связи. Установлено, что взаимодействие с атомами металлов приводит к изменению электронной структуры полимера с полупроводниковой на проводящую. В рамках теории Элиашберга показана возможность появления сверхпроводящего состояния в полимерах с кальцием.

Теоретическая значимость исследования заключается в изучении контактного взаимодействия между монослоями VTe_2 и графеном, которое способствует переходу в состояние спинового полуметалла, появлению оси лёгкого намагничивания в $T\text{-VTe}_2$, увеличению ширины запрещённой зоны в $H\text{-VTe}_2$, появлению дырочного допирования и расщеплению конуса Дирака в графене. Полученные результаты для интерфейсного сверхпроводника $\text{FeSe}/\text{SrTiO}_3$ обосновывают необходимость привлечения дополнительных механизмов, таких как сильные электронные корреляции или нематичность для объяснения наблюдаемой топологии поверхности Ферми.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики обуславливается тем, что предложенная вертикальная гетероструктура на основе монослоя VTe_2 с октаэдрической конфигурацией атомов ванадия и графена $T-VTe_2$ /графен/ $T-VTe_2$ перспективна для использования в элементах спинтроники в качестве магнитной туннельной структуры, управляемой переносом спинового момента. Полимеры на основе тетраоксо[8]циркулена и атомов Li, Na и Ca представляют интерес для электроники; полимеры тетраоксо[8]циркулена, допированные атомами Ca, перспективны для создания магнитных квантовых битов.

Достоверность полученных результатов определяются корректностью выбранных приближений и алгоритмов для описания каждой из рассмотренных структур с учётом особенностей типа взаимодействия в композите, а также согласованием полученных результатов с имеющимися в литературе экспериментальными и теоретическими данными.

Личный вклад соискателя заключается в проведении расчётов, обработке и интерпретации полученных результатов, а также их представлении в формате докладов и научных публикаций.

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.

На заседании 04.02.2022 г. диссертационный совет сделал вывод о том, что диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, содержит решение научной задачи, имеющей значение для развития физики конденсированного состояния, соответствует критериям, установленным Положением ВАК РФ о порядке присуждения учёных степеней, и принял решение присудить Бегунович Л. В. учёную степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 9 докторов наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени –

19, против присуждения учёной степени – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

диссертационного совета 24.1.228.01

д.ф.-м.н., академик РАН

Учёный секретарь

диссертационного совета 24.1.228.01

д.ф.-м.н., с.н.с.



Шабанов В. Ф.

Втюрин А. Н.

04 февраля 2022 года