

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 003.075.01 НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО НАУЧНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ «ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КРАСНОЯРСКИЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК» (ФИЦ КНЦ СО РАН) ФАНО ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК.

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 21 февраля 2018 года №1

О присуждении Куклину Артему Валентиновичу ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Особенности взаимодействий полуметаллических ферромагнетиков с некоторыми полупроводниковыми нанообъектами» по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния» принята к защите 15.12.2017 г., протокол № 16 диссертационным советом Д 003.075.01 на базе Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН), ФАНО, 660036, г. Красноярск, Академгородок 50, приказ Минобрнауки №1513/НК от 25.11.2016 г.

Соискатель Куклин Артем Валентинович 1987 г. рождения, в 2013 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Сибирский федеральный университет» (СФУ). В 2017 году освоил программу подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре на базе Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Сибирский федеральный университет» (СФУ). В настоящее время работает в должности инженера-исследователя в научно-исследовательской части СФУ.

Диссертация выполнена на кафедре физической и неорганической химии Института цветных металлов и материаловедения СФУ.

Научный руководитель: д.х.н., Денисов Виктор Михайлович, профессор-консультант кафедры физической и неорганической химии СФУ.

Официальные оппоненты: Некрасов Игорь Александрович, д.ф.-м.н. чл.-корр. РАН, г.н.с. лаборатории теоретической физики Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук», г. Екатеринбург; Сорокина Любовь Юрьевна, к.ф.-м.н., с.н.с. лаборатории моделирования новых материалов Федерального государственного бюджетного научного учреждения Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов, г. Троицк, Московская область, дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск, в своем положительном заключении, подписанном д.х.н., г.н.с. лаборатории физикохимии наноматериалов, указала, что работа выполнена на высоком научном уровне, аккуратно оформлена, основные результаты опубликованы в ведущих международных журналах в области наноматериалов, входящих в систему цитирования Web of Sciences. Куклиным А.В. решена задача, связанная с компьютерным моделированием магнитных низкоразмерных гетероструктур. Диссертация является законченной научной работой, имеющей заметное значение для развития представлений о физических свойствах ферромагнитных материалов. Результаты работы могут быть использованы в научно-исследовательских организациях и вузах, занимающихся исследованиями в области магнитных материалов.

Соискатель имеет 30 опубликованных работ, в т. ч. по теме диссертации 6 работ, из них 4 в рецензируемых научных изданиях: 1. Kuklin, A.V. Two-dimensional hexagonal CrN with promising magnetic and optical properties: A theoretical prediction / A.V. Kuklin, A.A. Kuzubov, E.A. Kovaleva, N.S. Mikhaleva, F.N. Tomilin, H. Lee, P.V. Avramov // *Nanoscale*.—2017.—Vol.9.—P. 621–630. 2. Kuklin, A.V. The direct exchange mechanism of induced spin polarization of low-dimensional  $\pi$ -conjugated carbon- and h-BN fragments at LSMO(001) MnO-terminated interfaces / A.V. Kuklin, A.A. Kuzubov, E.A. Kovaleva, H. Lee, P.B. Sorokin, S. Sakai, S. Entani, H. Naramoto, P. Avramov // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2017. – Vol. 440. – P. 23–29. 3. Avramov, P. Theoretical Investigation of the Interfaces and

Mechanisms of Induced Spin Polarization of 1D Narrow Zigzag Graphene- and h-BN Nanoribbons on a SrO-Terminated LSMO(001) Surface / P. Avramov, A.A. Kuzubov, A.V. Kuklin, H. Lee, E.A. Kovaleva, S. Sakai, S. Entani, H. Naramoto, P.B. Sorokin // *Journal of physical chemistry A*. – 2017. – Vol. 121. – P. 680–689. 4. Куклин А.В. Квантово-химическое исследование структуры и свойств моно- и бислоев CrN / А.В. Куклин, А.А. Кузубов, В.М. Денисов, Е.А. Ковалева, С.А. Шостак. // *Вестник СибГАУ*. – 2015. – Т. 16, № 2. – С. 450–455. Объем публикаций – 2,125 п.л.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы: *Ведущая организация*. Отзыв положительный. Замечания: 1. Какое влияние граничные атомы водорода оказывают на положение наноленты и ее искривление на поверхности манганита? 2. Почему корреляция энергии связи компонентов с межслоевым расстоянием не наблюдается в случае Mn-O терминированной поверхности? 3. Как вывод о химическом взаимодействии между  $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$  и пентаценом согласуется с «глобальным минимумом электронной плотности» между ними, проиллюстрированным на рис. 19а? 4. В диссертации не указан метод расчета диэлектрической функции. Учитывались ли экситонные эффекты при расчете? *Д.ф.-м.н. Некрасов И.А. – официальный оппонент*. Отзыв положительный. Замечания: 1. Какое влияние на электронную структуру интерфейсов на основе LSMO окажет учет спин-орбитального взаимодействия? 2. Как учет спин-орбитального взаимодействия повлияет на физические свойства интерфейса  $h\text{-CrN}/\text{Mo}(\text{S},\text{Se})_2$  систем, а также на их оптические свойства. 3. В работе не представлен анализ или модельное рассмотрение обменных взаимодействий в изучаемых системах. Также в работе нет оценок соответствующих величин обменных взаимодействий. *К.ф.-м.н. Сорокина Л.Ю. – официальный оппонент*. Отзыв положительный. Замечания: 1. Из текста диссертации не совсем понятна мотивация для выбора изучаемых материалов. 2. Нет пояснений, что такое TDOS и PDOS для нанолент, какая между ними разница? Плотности состояний лент сильно локализованы, хотя структура имеет периодичность. 3. В главе 4 на рисунке 22 представлен «график фононных колебаний» монослоя  $h\text{-CrN}$ , в котором присутствуют мнимые частоты. Следует более подробно остановиться вопросе возникновения мнимой частоты и разобрать его более детально. 4. Было бы полезно построить поверхность потенциальной энер-

гии для гетероструктур  $h\text{-CrN}/\text{Mo}(\text{S},\text{Se})_2$  в зависимости от взаимного расположения составных частей друг относительно друга.

*К.ф.-м.н. с.н.с. лаборатории компьютерного дизайна материалов Сколковского института науки и технологий Квашинин А.Г.* Отзыв положительный. Замечания: 1. Возникает вопрос касательно стабильности свободнолежащего слоя  $h\text{-CrN}$ , является ли он динамически стабильным? Кроме того, какова энергия образования этого монослоя? Оценивались ли условия образования такой структуры? 2. Хотелось бы сравнить рассчитанные спектры отдельных слоев  $\text{MoS}_2$  и  $\text{MoSe}_2$  с теми, что представлены для композитов. *Д.т.н., профессор Донского государственного технического университета Илясов В. В.* Отзыв положительный. Замечание: Из текста автореферата (см. авт., стр.12) не ясно о каком «прямом обменном взаимодействии с поверхностью  $\text{MnO}_2$ » идет речь и какими параметрами подтверждается его наличие. *К.ф.-м.н, н.с. НИТУ «МИСиС» Попов З. И.* Отзыв положительный. Замечания: 1. Из текста не ясно на основании чего делается вывод о том, что за поляризуемость 4-ZBNR ленты отвечает не прямое обменное взаимодействие. 2. В работе не указано явным образом несоответствие параметров решетки составных слоев, рассматриваемых гетероструктур.

Обзор отзывов. Среди важных полученных в диссертационной работе результатов, а также достоинств работы отмечены следующие: показана спиновая поляризация графеновых нанолент и молекулы пентацена на уровне Ферми при их размещении на LSMO, при этом поверхность, завершенная  $\text{Mn-O}$  слоем, вызывает большую амплитуду спиновой поляризации; предсказано существование квази-двумерной гексагональной модификации  $\text{CrN}$  ( $h\text{-CrN}$ ), обладающей 100% спиновой поляризацией на уровне Ферми и ферромагнитным упорядочением; в бис-слое  $h\text{-CrN}$  ферромагнетизм и высокая степень спиновой поляризации сохраняются, а величина гофрировки увеличивается по сравнению с монослоем; тип проводимости гетероструктур  $h\text{-CrN}/\text{MoS}_2$  может изменяться от полупроводникового до полуметаллического в зависимости от положения слоев относительно друг друга.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обусловлен тем, что оппоненты и сотрудники ведущей организации являются ведущими, как в

России, так и в мире специалистами в области физики конденсированного состояния, в частности теоретических исследований наноматериалов.

Совет отмечает, что в ходе выполненных соискателем исследований, методами теории функционала плотности было проведено моделирование ряда гетероструктур на основе ферромагнитного материала  $\text{La}_{2/3}\text{Sr}_{1/3}\text{MnO}_3$  (LSMO) с пентаценом, углеродными и  $h$ -BN нанолентами с краями типа «зигзаг». Предсказана спиновая поляризация нанообъектов в составе гетероструктур. Тип проводимости графеновой ленты изменяется с полупроводникового на спиновый полуметаллический при контакте с поверхностью LSMO. Показано влияние завершающего слоя LSMO на спиновую поляризацию углеродных нанообъектов.

Рассмотрена двумерная модификация CrN ( $h$ -CrN) с гексагональным типом решетки, обладающая 100% спиновой поляризацией на уровне Ферми и ферромагнитным упорядочением. Обнаружено, что в гетероструктурах с  $\text{MoS}_2$  тип проводимости может изменяться от полупроводникового до полуметаллического в зависимости от расположения слоев относительно друг друга.

*Теоретическая значимость работы* обоснована тем, что, на основании проведенных расчетов показано наличие спиновой поляризации в нанообъектах при контакте с поверхностью LSMO и зависимость эффективности поляризации от завершающего слоя LSMO. Определено влияние эффекта близости молекулы с полуметаллическим ферромагнитным твердым телом на молекулярные орбитали пентацена. Впервые была теоретически предсказана и исследована двумерная модификация CrN, обладающая свойствами спинового полуметалла, рассчитаны свойства интерфейсов в составе с  $\text{MoS}_2$  и  $\text{MoSe}_2$ .

*Значение полученных соискателем результатов исследования для практики* заключается в определении интерфейсных взаимодействий в гетероструктурах, содержащих магнитные слои и полупроводниковые материалы. Полученные результаты указывают способ достижения эффективной спиновой инжекции при конструировании устройств спинтроники на основе LSMO. Предсказанная стабильность и свойства гексагонального нитрида хрома атомной толщины позволят ускорить разработку низкоразмерных магнитных материалов и устройств на их основе.

*Достоверность* полученных результатов подтверждается использованием апробированных теоретических подходов и грамотным выбором схемы расчета, учитывающей электронные корреляции и дисперсионные взаимодействия в слоистых системах, а также сравнением полученных результатов с экспериментальными и теоретическими данными других авторов. Основные результаты обсуждены на международных и российских конференциях и опубликованы в профильных журналах с высоким рейтингом.

*Личный вклад соискателя* заключается в постановке целей и задач, их решении, планировании и непосредственном проведении расчетов, обобщении и интерпретации полученных результатов, подготовке научных статей.

На заседании 21 февраля 2018 года диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным Положением ВАК РФ о порядке присуждения ученых степеней, и принято решение присудить Куклину Артему Валентиновичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 10 докторов физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния» и 9 - по специальности 01.04.11 – «Физика магнитных явлений», участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени - 19, против - 0, недействительных бюллетеней - 0.

Председатель  
диссертационного совета Д 003.075.01  
д.ф.-м.н., академик РАН

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 003.075.01  
д.ф.-м.н., с.н.с.



Шабанов В.Ф.

Втюрин А.Н.

21.02.2018 г.