

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Бегунович Людмилы Витальевны «Структура и свойства соединений VTe_2 /графен, VTe_2 /графен/ VTe_2 , $\text{FeSe}/\text{Se}/\text{SrTiO}_3$ и допированных атомами металлов тетраоксо[8]циркуленов», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния

Появление графена и других слоистых материалов проложило путь новому поколению устройств на основе двумерных (2D) и квазидвумерных материалов благодаря их уникальным зависящим от толщины физическим и химическим свойствам. Создание новых 2D материалов, удовлетворяющих требованиям современных устройств, является актуальной и интенсивно развивающейся областью физики конденсированного состояния и материаловедения. Последние разработки, связанные с химическим синтезом и структурным дизайном 2D материалов и композитов на их основе, позволяют улучшать функциональные возможности таких материалов, благодаря допированию атомами других элементов, использованию процессов самосборки из молекул, а также созданию гетероструктур из отдельных монослоёв. Помимо дополнительных функциональных возможностей, использование 2D материалов позволяет уменьшать размеры устройств, облегчает контроль толщины отдельных элементов, позволяет увеличить плотность размещения элементов в микросхеме. Использование 2D материалов, полученных из слоистых Ван-дер-ваальсовых структур, решает вопрос с химической стабильностью, благодаря отсутствию оборванных связей на поверхности материала. В связи с вышесказанным, **тема диссертации Бегунович Л. В.**, направленная на исследование новых металлических и металлоорганических квазидвумерных материалов на основе монослоёв дителлурида ванадия, селенида железа и тетраоксо[8]циркулена для элементов спинтроники и электроники, в том числе сверхпроводящей электроники, **является актуальной.**

Вх. № 287-05/6224/3

от 18.01.2022 г.

Представленная диссертация чётко структурирована, состоит из введения, четырёх глав, выводов и списка литературы, изложена на 120 печатных страницах. Во введении приведено описание актуальности, новизны и практической значимости исследования, указаны цель и задачи, приведены выносимые на защиту положения, указан личный вклад соискателя, апробация работы, достоверность результатов. **Первая глава** является обзорной. В ней рассмотрены перспективы применения двумерных и квазидвумерных материалов для решения существующих проблем в наиболее интенсивно развивающихся областях физики конденсированного состояния, а также методы исследования таких материалов, основанные на теории функционала плотности. Далее следует оригинальная часть работы.

Во второй главе представлены результаты моделирования структуры и свойств новых вертикальных гетероструктур на основе монослоёв дителлурида ванадия и графена, изучено контактное взаимодействие между монослоями. Впервые показано, что добавление слоя графена приводит к перестройке электронной структуры $T\text{-VTe}_2$ с формированием 100 % спиновой поляризации, что делает данный монослой перспективным материалом для спинтроники. Величина спиновой поляризации уменьшается при добавлении второго слоя VTe_2 в систему. Слои VTe_2 с октаэдрической конфигурацией атомов ванадия ($T\text{-VTe}_2$) в контакте с графеном имеют выделенную ось лёгкого намагничивания вдоль «зигзаг» направления графена, в то время как в изолированном монослое $T\text{-VTe}_2$ все направления в плоскости слоя энергетически эквиваленты. Перенос заряда с графена на слой VTe_2 приводит к дырочному допированию электронной структуры графена. Взаимодействие графена с VTe_2 приводит к обменному расщеплению конуса Дирака. Энергия взаимодействия слоёв VTe_2 и графена не зависит от взаимной укладки слоёв. Формирование гетероструктур графена с $T\text{-VTe}_2$ энергетически предпочтительнее, чем с $H\text{-VTe}_2$ (тетраэдрическая конфигурация). Незначительная энергетическая разница между конфигурациями с параллельным и антипараллельным спиновым упорядочением магнитных слоёв в трёхслойной гетероструктуре $\text{VTe}_2/\text{графен}/\text{VTe}_2$ указывает на практическую

возможность независимого перемагничивания слоёв. Оценённое значение туннельного магнитного сопротивления указывает на перспективы использования данной гетероструктуры в устройствах спинтроники, управляемых переносом спинового момента.

В третьей главе впервые оценено влияние наблюдаемого в эксперименте дополнительного слоя селена, расположенного между монослоем селенида железа и двойным Ti-O слоем подложки SrTiO_3 на электронную структуру $\text{FeSe}/\text{SrTiO}_3$. Результаты расчётов показали, что дополнительный слой селена не приводит к изменениям электронной структуры, необходимым для объяснения экспериментальных данных, а именно, к исчезновению листов поверхности Ферми вблизи центра зоны Бриллюэна. Показано, что причина заключается в том, что в присутствии вакансий кислорода в двойном Ti-O слое, атом селена локализует на себе заряд, препятствуя его переносу с подложки на монослой FeSe . Полученный результат является важным и стимулирует дальнейшее развитие теории железосодержащих сверхпроводников с привлечением дополнительных механизмов, таких как сильные электронные корреляции или нематичность.

В четвёртой главе смоделированы новые двумерные металлоорганические полимеры на основе тетраоксо[8]циркулена (ТОС) и атомов Li, Na и Ca, определены энергетически предпочтительные конфигурации. Показано, что внедрение атомов Li и Na приводят к изменению электронной структуры полимеров с полупроводниковой на металлическую. С помощью расчётов спектральной функции Элиашберга и константы электрон-фононного взаимодействия показана возможность появления сверхпроводящего состояния в полимерах с кальцием. Выявлено, что атомы кальция находятся в дублетном спиновом состоянии, что делает ТОС-Ca перспективными для создания магнитных квантовых битов.

Результаты, полученные в диссертации, **являются новыми**, выводы и защищаемые положения **обоснованы**. Достоверность полученных результатов обоснована использованием современных методов исследования структуры и свойств материалов, а также согласованием полученных результатов с

экспериментальными и теоретическими данными, имеющимися в литературе. Основные результаты диссертации обсуждались на 6 конференциях. Основные положения и выводы диссертационной работы в полной мере изложены в трёх научных статьях в изданиях из перечня ВАК, которые проиндексированы в наукометрических системах Web of Science и Scopus.

Представленная диссертация производит впечатление **оригинального законченного исследования**, вносит существенный вклад в решение ряда фундаментальных и практических задач. Материал изложен чётко, в логической последовательности. Автореферат диссертации полностью соответствует содержанию диссертации. Полученные результаты могут быть использованы для синтеза и изучения свойств новых функциональных наноматериалов. Предложенное слоистое соединение $T\text{-VTe}_2/\text{графен}/T\text{-VTe}_2$ является перспективным для применения в качестве магнитной туннельной структуры в новых наноустройствах спинтроники, управляемых переносом спинового момента. Полимеры на основе тетраоксо[8]циркулена и атомов Li и Na представляют интерес для электротехники, полимеры тетраоксо[8]циркулена, допированные атомами Ca, перспективны для создания магнитных квантовых битов. Результаты расчётов $\text{FeSe}/\text{SrTiO}_3$ стимулируют дальнейшее развитие теории с учётом сильных электронных корреляций или нематичности.

Следует отметить имеющиеся в диссертационной работе недостатки:

1. В разделе 4.2 описаны результаты расчетов критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние T_c , однако, в отличие от других разделов, не описаны подробности расчета 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 то 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.

Отмеченные недостатки не снижают качество работы и не влияют на основные результаты диссертации. Диссертационная работа «Структура и свойства соединений VTe_2 /графен, VTe_2 /графен/ VTe_2 , $\text{FeSe}/\text{Se}/\text{SrTiO}_3$ и допированных атомами металлов тетраоксо[8]циркуленов», **соответствует требованиям ВАК**, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук, а её автор Бегунович Людмила Витальевна заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент

Доктор физико-математических наук

(Специальность 01.04.07 Физика конденсированного состояния),

член-корреспондент РАН, ведущий научный сотрудник

лаборатории теоретической физики

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

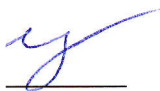
Институт электрофизики Уральского отделения РАН,

Адрес: 620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 106

Тел.: +79122451427

E-mail: nekrasov@iep.uran.ru

«12» января 2022 г.



Некрасов Игорь Александрович

*Подпись Некрасова И.А. заверено
лично секретарь ИЭФ УРО РАН*

Спе



Секретарь ИЭФ

СПИСОК

избранных публикаций официального оппонента д-р физ.-мат. наук
Некрасова И. А. за последние 5 лет по теме диссертации Бегунович Л.В.
«Структура и свойства соединений VTe_2 /графен, VTe_2 /графен/ VTe_2 ,
 $FeSe/Se/SrTiO_3$ и допированных атомами металлов тетраоксо[8]циркуленов»

1. Nekrasov I. A. et al. Quantitative Comparison of LDA + DMFT and ARPES Spectral Functions // JETP Letters. – 2021. – V. 113. – P. 115-119.
2. Korshunov M. M. et al. Band Structure of Tungsten Oxide $W_{20}O_{58}$ with Ideal Octahedra // JETP Letters. – 2021. – V. 113. – P. 57-60.
3. Slobodchikov A. A. et al. Simplicity Out of Complexity: Band Structure for $W_{20}O_{58}$ Superconductor // Nanomaterials. – 2021. – V. 11. – P. 97.
4. Bezotosnyi P. I. et al. Electronic band structure and superconducting properties of $SnAs$ // Physical Review B. – 2019. – V. 100. – P. 184514
5. Nekrasov I. A. et al. Electronic structure of $FeSe$ monolayer superconductors: shallow bands and correlations // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2018. – V. 126. – P. 485-496.
6. Nekrasov I. A. et al. Hidden Fermi Surface in $K_xFe_{2-y}Se_2$: LDA+ DMFT Study // JETP Letters. – 2018. – V. 108. – P. 623-626.

Официальный оппонент

Доктор физико-математических наук

(Специальность 01.04.07 Физика конденсированного состояния),

член-корреспондент РАН, ведущий научный сотрудник

лаборатории теоретической физики

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт электрофизики Уральского отделения РАН,

Адрес: 620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 106

Тел.: +79122451427

E-mail: nekrasov@iep.uran.ru

«12» января 2022 г.

Некрасов Игорь Александрович

Пункт Некрасов И.А. заверено
ученом секретаря ИЭФ УрО РАН

См.



Секретарь ИЭФ