

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Бегунович Людмилы Витальевны «Структура и свойства соединений  $VTe_2$ /графен,  $VTe_2$ /графен/ $VTe_2$ ,  $FeSe/Se/SrTiO_3$  и допированных атомами металлов тетраоксо[8]циркуленов», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния

Моделирование методами теории функционала плотности занимает важное место в разработке и изучении новых материалов для всех отраслей промышленности и науки. Современные методы позволяют рассчитывать не только макроскопические свойства материалов, но и контактные взаимодействия в различного рода гетероструктурах. В диссертации Л. В. Бегунович представлены новые результаты моделирования методами теории функционала плотности структуры и свойств ряда слоистых соединений  $VTe_2$ /графен,  $VTe_2$ /графен/ $VTe_2$ ,  $FeSe/Se/SrTiO_3$  и допированных атомами металлов тетраоксо[8]циркуленов. Данные материалы перспективны для использования в электронике, в том числе сверхпроводящей, спинtronике, электротехнике и для создания квантовых компьютеров, чем и определяется актуальность работы.

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, выводов и списка литературы. Первая глава посвящена литературному обзору по теме диссертации и описанию применяемых методов расчёта. Во второй главе приведены результаты исследования новых интерфейсных гетероструктур, состоящих из слоёв дителлурида ванадия и графена. Подробно изучена атомная и электронная структура двухслойных и трёхслойных гетероструктур, найдены энергетически предпочтительные конфигурации, рассчитаны магнитные моменты, энергия магнитной анизотропии, изучено влияние контактного взаимодействия на атомную и электронную структуру слоёв  $VTe_2$  и графена. Для энергетически выгодной трёхслойной гетероструктуры  $VTe_2$ /графен/ $VTe_2$  рассчитана величина туннельного магнетосопротивления в рамках модели Жюльера. В работе впервые показано, что при взаимодействии с графеном слой  $VTe_2$  с октаэдрической конфигурацией атомов ванадия ( $T-VTe_2$ ) становится спиновым полуметаллом и приобретает выделенную ось лёгкого намагничивания вдоль «зигзаг» направления графена, что делает данный монослой перспективным материалом для спинtronики. Энергия взаимодействия слоёв графена и  $VTe_2$  не зависит от способа взаимной укладки. Маленькая энергетическая разница между конфигурациями с параллельным и антипараллельным спиновым упорядочением магнитных слоёв в трёхслойной гетероструктуре  $VTe_2$ /графен/ $VTe_2$  указывает на возможность лёгкого перемагничивания верхнего слоя без изменения магнитного упорядочения нижнего. Выявлено обменное расщепление конусов Дирака и дырочное допирование для слоя графена. Рассчитанное значение туннельного магнитного

сопротивления (220 %) говорит о возможности использования гетероструктуры  $T$ - $VTe_2$ /графен/ $T$ - $VTe_2$  в качестве магнитной туннельной структуры для новых устройств спинtronики.

В третьей главе изучено влияние наблюдаемого в эксперименте дополнительного слоя селена, расположенного между монослоем FeSe и подложкой, на электронную структуру и перенос заряда в FeSe/SrTiO<sub>3</sub>. Определены энергетически предпочтительные положения атомов Se, как в бездефектной структуре, так и в структуре с вакансиями по кислороду в верхнем Ti-O слое. Показано, что дополнительный слой селена не приводит к исчезновению листов поверхности Ферми вблизи центра зоны Бриллюэна. В присутствии вакансий кислорода атом Se локализует на себе заряд, препятствуя его переносу с подложки на монослой FeSe. Полученный результат является важным и стимулирует дальнейшее развитие теории сверхпроводников на основе железа с привлечением дополнительных механизмов, таких как сильные электронные корреляции или нематичность.

В четвёртой главе изучена структура и свойства новых металлоорганических полимеров на основе тетраоксо[8]циркулена (ТОС) и атомов щелочных и щелочноземельных металлов, таких как Li, Na и Ca. Показано, что локализация атомов металла зависит от размера пор: полимеры с более крупными порами способствуют локализации атомов в плоскости поры. Атомы Li и Na оказывают значительное влияние на полимеры, что приводит к изменению их электронной структуры с полупроводниковой на проводящую. ТОС, допированные кальцием, демонстрируют высокую плотность состояний вблизи уровня Ферми. Расчёты функции Элиашберга и константы электрон-фононного взаимодействия показали, что в полимерах с кальцием возможна индуцированная сверхпроводимость с  $T_c = 14,5$  К. Атомы кальция находятся в дублетном спиновом состоянии. Сочетание сверхпроводимости и дублетного спинового состояния атомов кальция делает ТОС-Са перспективными для создания магнитных квантовых битов.

В заключительной части диссертации приведены основные результаты и выводы, отражающие многоплановость и большой объём проделанной работы.

Результаты, представленные в диссертации, являются новыми и оригинальными, выводы и защищаемые положения обоснованы. Достоверность полученных результатов определяется корректностью выбранных приближений и алгоритмов для описания каждой из рассмотренных структур с учётом особенностей типа взаимодействия в композите и электронного строения его составных частей, а также согласованием полученных результатов с имеющимися в литературе экспериментальными и теоретическими данными.

Научная новизна заключается в том, что впервые смоделирована структура и свойства ряда новых двумерных и квазидвумерных материалов  $VTe_2$ /графен и  $VTe_2$ /графен/ $VTe_2$ , ТОС-Ме (Ме = Li, Na и Ca), а также влияние дополнительного слоя селена на электронную структуру и перенос заряда в железосодержащем сверхпроводнике FeSe/SrTiO<sub>3</sub>. Проведён подробный теоретический анализ

атомной и электронной структуры этих материалов, результаты которого позволяют оценить перспективы их практического применения. Выше в отзыве по Главам уже были приведены возможные практические реализации результатов диссертации.

Основные результаты диссертации обсуждались на 6 конференциях. Положения и выводы диссертационной работы в полной мере изложены в трёх научных статьях в изданиях из перечня ВАК, которые проиндексированы в научометрических системах Web of Science и Scopus.

Диссертационная работа Л. В. Бегунович является самостоятельным законченным исследованием. Материал изложен чётко и логично. Содержание автореферата соответствует основным идеям и выводам диссертации.

К работе имеются следующие вопросы и 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 VTe<sub>2</sub>/графен/VTe<sub>2</sub> в которой, согласно рисунку 2.14 отсутствует искажение графенового слоя, который остается идеально двумерным, что, вероятно, не соответствует действительности.

Сделанные замечания несут рекомендательно-дискуссионный характер и не снижают общую положительную оценку диссертации, являющейся законченной научно-квалификационной работой. Содержание автореферата в полной мере соответствует содержанию диссертации. Считаю, что представленная диссертационная работа **удовлетворяет всем требованиям ВАК**, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор Л. В. Бегунович заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент

Кандидат физико-математических наук

(Специальность 01.04.07 Физика конденсированного состояния),

старший научный сотрудник, заведующий лабораторией

молекулярного имиджинга и фотоакустики

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Институт физики прочности и материаловедения  
Сибирского отделения Российской академии наук,  
Адрес: 634055, г. Томск, просп. Академический, 2/4  
Тел.: +79069490071  
E-mail: [alex@ispms.ru](mailto:alex@ispms.ru)

«17» августа 2022 г.



Пономарев Александр Николаевич

Подпись А. Н. Пономарева заверяю

Уч. секретарь ИФПМ СО РАН Н. к. ф.-м. н.



Н.Ю. Матолыгина

«17» августа 2022 г.

## СПИСОК

избранных публикаций официального оппонента канд. физ.-мат. наук Пономарева А. Н. 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 дипированных атомами металлов тетраоксо[8]циркуленов»

1. Ponomarev N. A. et al. Electronic structure of multiwalled carbon nanotubes with impurities and defects // AIP Conference Proceedings. – 2019. – V. 2167. – P. 020282.
  2. Povoroznyuk S. N. et al. Experimental and theoretical study of electronic structure of disordered MWCNTs // Carbon. – 2019. – V. 153. – P. 40-51.
  3. Bobenko N. G. Computer modeling of structure and calculation of the short-range order parameters disordered two-layers AB graphene // Book of abstracts of Multiscale biomechanics and tribology of inorganic and organic systems. – Tomsk: Tomsk State University. – 2019. – P. 223-224.
  4. Bobenko N. G. et al. Low temperature characteristics of electronic density of states in epitaxial graphene // Journal of Structural Chemistry. – 2018. – V. 59. – P. 853-859.
  5. Ponomarev N. A. et al. Low-temperature peculiarities of density of electronic states and electron transport characteristics in the disordered 2D graphene // Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures. – 2018. – V. 26. – P. 152-157.
  6. Bobenko N. G. et al. Density of electronic states of disordered two-layer AB graphene // Book of abstracts of AIP Conference Proceedings: AIP Publishing LLC. – 2018. – V. 2051. – P. 020032.

## Официальный оппонент

## Кандидат физико-математических наук

(Специальность 01.04.07 Физика конденсированного состояния),

старший научный сотрудник, заведующий лабораторией

## молекулярного имиджинга и фотоакустики

## Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт физики прочности и материаловедения

Сибирского отделения Российской академии наук.

Адрес: 634055, г. Томск, просп. Академический, 2/4

Тел.: +79069490071

E-mail: [alex@ispms.ru](mailto:alex@ispms.ru)

«17» октября 2022 г.



Пономарев Александр Николаевич

Подпись А. Н. Пономарева заверяю

Уч. секретарь ИФПМ СО РАН, к. ф.-м. н.

Walt

Н.Ю. Матолыгина

«17» сентябрь 2022 г.