

Отзыв

официального оппонента, члена-корреспондента РАН, профессора, заведующего лабораторией технологии двумерной микроэлектроники Института автоматики и процессов управления ДВО РАН **Зотова Андрея Вадимовича** на диссертационную работу **Ковалевой Евгении Андреевны** «**Исследование контактных взаимодействий в интерфейсах на основе некоторых 0D и 1D нанобъектов и ферромагнитных материалов методами квантовой химии**», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния.

Применение методов квантовой химии зачастую позволяет предсказать, либо объяснить свойства сложных материальных систем, в частности, описать контактные взаимодействия в различного рода гетероструктурах. Квантово-химическое моделирование позволяет наглядно визуализировать происходящие при образовании таких структур изменения электронной структуры, а также установить вклад в электронные свойства полученного гибридного материала от каждой из его составных частей. В работе Е.А. Ковалевой рассмотрены наноконпозиты на основе ноль-мерных (молекулы комплексного соединения иридия и фуллерена C_{60}) и одномерных (углеродные и BN нанотрубки) нанобъектов и ферромагнитных подложек. Данные материалы перспективны для использования в качестве элементов спинтроники, одной из наиболее интенсивно развивающихся областей нанoeлектроники, а также для формирования на их основе нанопленок металлического иридия.

Достоверность полученных в работе результатов обусловлена индивидуальным подбором набора методов и подходов для описания каждого из рассмотренных интерфейсов с учетом особенностей типа взаимодействия в композите и электронного строения его составных частей;

использованием надежных квантово-химических пакетов VASP, Orca и OpenMX, а также сопоставлением полученных результатов с экспериментальными и теоретическими данными других авторов.

Научная новизна. Впервые изучены интерфейсы углеродных и BN нанотрубок с поверхностями кобальта и никеля, исследованы закономерности распределения электронной и спиновой плотности в данных системах. Показано влияние расположения фуллерена C_{60} относительно подложки на свойства нанокompозита, в частности, величину магнитного момента и спиновой поляризации на фуллерене. Предложен механизм разложения ацетилацетонатного комплексного соединения иридия на поверхности железа и в газовой фазе.

Практическая значимость диссертационной работы заключается в теоретическом предсказании свойств нанокompозитов, которые могут послужить основой для экспериментальных исследований, посвященных оптимизации MOCVD процесса получения нанопленок иридия и разработке спиновых клапанов для применения в различных областях науки и техники.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, выводов и списка литературы из 143 наименований. Объем диссертации составляет 123 страницы, включая 37 рисунков и 10 таблиц.

Во введении дается краткий анализ актуальности темы диссертации, сформулированы цели, научная новизна и практическая значимость исследований, приведены основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе проведен анализ литературы, посвященной изучению интерфейсов различных нанообъектов, таких как графен, h-BN, углеродные нанотрубки, фуллерены и наноразмерные металлические пленки, с подложками ферромагнитных металлов, а также полуметаллического материала LSMO. Обзор достаточно полно отражает современное состояние исследований, направленных на теоретическое моделирование свойств нанокompозитов, потенциально пригодных для использования в спинтронике,

а также исследование MOCVD процесса получения наноразмерных пленок благородных металлов.

Во второй главе приведено обоснование теоретических методов, выбранных для корректного описания исследуемых структур. Приведены основные принципы, преимущества и недостатки теории функционала плотности с применением приближения локальной спиновой плотности и обобщенного градиентного приближения, методы описания систем с наличием сильных электронных корреляций и слабых ван-дер-ваальсовых взаимодействий. Изложены подходы к описанию волновой функции системы, дана характеристика метода проектирования присоединенных волн (PAW) и псевдопотенциалов Вандербиля. Обозначены используемые в процессе оптимизации электронной структуры и геометрии систем методы численного моделирования, а также подходы к поиску переходного состояния и энергетических барьеров перехода.

В третьей главе изложены результаты моделирования интерфейсов переходных металлов с углеродными и BN нанотрубками и фуллереном C_{60} . Установлено наличие сильного взаимодействия между составными частями композита, приводящее к значительному изменению электронной структуры нанотрубок и фуллерена C_{60} . Во всех исследованных структурах наблюдается возникновение спиновой поляризации нанобъекта при контакте с подложкой ферромагнитного металла. При этом в случае BN нанотрубок наибольшее влияние подложки испытывает часть нанотрубки, непосредственно контактирующая с металлом, в то время в случае углеродных структур аналогичные изменения наблюдаются по всему диаметру нанобъекта.

В четвертой главе рассматриваются аналогичные нанокompозиты на основе полуметаллического материала LSMO, обладающего спиновой поляризацией $\sim 100\%$ на уровне Ферми. Установлена ключевая роль взаимодействия углеродных наноструктур с атомами марганца в

формировании на них магнитного момента и спиновой поляризации на уровне Ферми.

Глава 5 посвящена изучению начального этапа формирования тонких пленок иридия в ходе MOCVD процесса путем разложения ацетилацетонатного комплекса $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$. Показана важность взаимодействия с подложкой железа для структурной перестройки комплекса, ведущей к ослаблению и разрыву связей Ir-C и Ir-O и облегчающей десорбцию газообразных продуктов реакции разложения.

В заключительной части диссертации перечисляются основные результаты и выводы, отражающие многоплановость и большой объем проделанной работы.

В целом, можно отметить, что научное значение диссертационной работы заключается в проведении теоретического анализа атомной и электронной структуры ряда нанокмполитов, результаты которого позволяют оценить перспективы их практического применения.

Однако диссертационная работа Е.А. Ковалевой не лишена недостатков. В частности, недостаточно обоснован выбор значений параметров U и J для расчета LSMO, а также неясно, для каких именно элементов использована коррекция Хаббарда, отсутствует сопоставление результатов моделирования LSMO с экспериментальными данными. Кроме того, отсутствует информация о том, все ли атомы композита были задействованы в процедуре оптимизации атомной структуры и поиска переходного состояния, что может оказывать влияние на результаты моделирования и, в частности, величину потенциальных барьеров. К незначительным замечаниям относится несоответствие числа страниц диссертации указанному в автореферате.

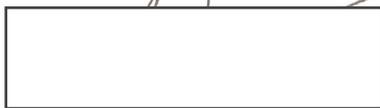
Отмеченные недостатки не умаляют общего положительного впечатления от диссертации, являющейся законченной научно-квалифицированной работой.

Результаты исследований Е.А. Ковалевой своевременно опубликованы в ведущих научных журналах и докладывались на конференциях всероссийского и международного уровня. Содержание автореферата в полной мере соответствует содержанию диссертации.

Считаю, что представленная диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Е.А. Ковалева заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния.

Заведующий лабораторией технологии
двумерной микроэлектроники Института
автоматики и процессов управления
Дальневосточного отделения РАН,
доктор физико-математических наук
по специальности 01.04.07 – физика
конденсированного состояния,
член-корреспондент РАН, профессор

Зотов Андрей Вадимович

Адрес: 690041, Россия, г. Владивосток,
ул. Радио, 5.

ФГБУН Институт автоматки и процессов управления
Дальневосточного отделения РАН

Раб. тел. +7 (423)231

Подпись Зотова А.В.





КАДРОВОЙ РАБОТЕ
 Вьюнкова И.В.

СПИСОК

трудов д.ф.-м.н. Зотова Андрея Вадимовича

№ п/п	Наименование работы	Вид работ	Выходные данные	Объем работы	Соавторы
1	2	3	4	5	6
1.	Ordered Mn-diluted Au/Si(111) reconstructions.	статья	Surface Science, Vol. 606, Iss.1-2, P.104-109 (2012)	6	Denisov N.V., Yakovlev A.A., Utas O.A., Azatyan S.G., Saranin A.A., Romashev L.N., Solin N.I., Ustinov V.V.
2.	Формирование и свойства тонких пленок силицидов железа на поверхности Si(111): моделирование из первых принципов.	статья	Письма в ЖТФ, Т.38, вып.5, С.28-34 (2012)	7	Куянов И.А., Алексеев А.А.
3.	Characterization of Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -(Au,In) surface by optical second-harmonic generation.	статья	Applied Surface Science, Vol.258, Iss. 10, P.4642-4644 (2012)	3	Ignatovich K.V., Saranin A.A.
4.	First-principles study of Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -In reconstruction.	статья	Surface Science, Vol. 606, P.1914-1917 (2012)	4	E.N. Chukurov, A.A. Alekseev, V.G. Kotlyar, D.A. Olyanich, A.A. Saranin.
5.	Self-assembly of C ₆₀ fullerenes on quasi-one-dimensional Si(111) 4×1 -In surface.	статья	Surface Science, Vol. 606, P.1821-1824 (2012)	4	V.G. Kotlyar, D.A. Olyanich, T.V. Utas, A.A. Saranin
6.	Surface conduction at phase transitions in (Au,Ag)/Si(111) submonolayer films.	статья	Applied Surface Science, Vol.258, Iss. 24, P.9636-9641 (2012)	6	D.A. Tsukanov, M.V. Ryzhkova, E.A. Borisenko, L.V. Bondarenko, A.V. Matetskiy, D.V. Gruznev, A.A. Saranin.
7.	The manipulation of C ₆₀ in molecular arrays with an STM tip in regimes below the decomposition threshold.	статья	Nanotechnology, Vol.24, P.055302-8 (2013)	8	Dmitry A Olyanich, Vasily G Kotlyar, Tatiana V Utas, Alexander A Saranin.
8.	Dim C ₆₀ fullerenes on Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Ag surface	статья	Surface Science, Vol. 612, P.31-36 (2013)	6	D.V. Gruznev, A.V. Matetskiy, L.V. Bondarenko, A.A. Saranin, J.P. Chou, C.M. Wei, Y.L. Wang
9.	Stepwise self-assembly of C ₆₀ mediated by atomic scale moiré magnifiers	статья	Nature Communications, Vol.4, Article number: 1679 DOI: 10.1038/ncomms2706, 7 P. (2013)	7	D.V. Gruznev, A.V. Matetskiy, L.V. Bondarenko, O.A. Utas, A.A. Saranin, M.Y.Lai, J.P. Chou, C.M. Wei, Y.L. Wang
10.	Large spin splitting of metallic	статья	Scientific Reports, Vol.3,	6	L.V. Bondarenko,

	surface-state bands at adsorbate-modified gold/silicon surfaces		Article number: 1826 DOI: 10.1038/srep01826, 6 P. (2013)		D.V. Gruznev, A.A. Yakovlev, A.Y. Tupchaya, D. Usachov, O. Vilkov, A. Fedorov, D.V. Vyalikh, S.V. Ereemeev, E.V. Chulkov, A.A. Saranin
11.	Peculiar diffusion of C ₆₀ on In-adsorbed Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Au surface	статья	Surface Science, Vol. 616, P.44-50 (2013)	7	A.V. Matetskiy, L.V. Bondarenko, D.V. Gruznev, A.A. Saranin, J.P. Chou, C.R. Hsing, C.M. Wei, Y.L. Wang
12.	Structural transformations in Pb/Si(111) phases induced by C ₆₀ adsorption	статья	Journal of Physics: Condensed Matter, Vol.25, No.39, P.395006 (8pp), (2013)	8	A.V. Matetskiy, L.V. Bondarenko, D.V. Gruznev, A.A. Saranin, M.C. Tringides
13.	Модификация держателя образца для сканирующего туннельного микроскопа VT STM (OMICRON)	статья	ПТЭ, № 6, С. 105-109, (2013)	5	В.Г. Котляр, Б.К. Чурусов, Д.А. Олянич, Т.В. Утас, Д.В. Грузнев, А.А. Саранин
14.	Effect of Na adsorption on structural and electronic properties of Si(111) $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ -Au surface	статья	Journal of Physics: Condensed Matter, Vol.26, No.5, P. 055009 (7 pp), (2014)	7	L.V. Bondarenko, A.V. Matetskiy, A.A. Yakovlev, A.Y. Tupchaya, D.V. Gruznev, M.V. Ryzhkova, D.A. Tsukanov, E.A. Borisenko, E.N. Chukurov, N.V. Denisov, O. Vilkov, D.V. Vyalikh, A.A. Saranin
15.	C ₆₀ layer growth on the Co/Si(111) $\sqrt{7}\times\sqrt{7}$ surface	статья	Applied Surface Science, Vol.292, P.954-957, (2014)	4	D.A. Olyanich, T.V. Utas, V.G. Kotlyar, A. A. Saranin, L. N. Romashev, N.I. Solin, V.V. Ustinov
16.	Two-dimensional bismuth–silver structures on Si(111)	статья	Surface Science, Vol. 623, P.17-24, (2014)	8	N.V. Denisov, E.N. Chukurov, Yu.V. Luniakov, O.A. Utas, S.G. Azatyan, A.A. Yakovlev, A.A. Saranin
17.	A strategy to create spin-split metallic bands on silicon using a dense alloy layer	статья	Scientific Reports, Vol.4, Article number: 4742 DOI: 10.1038/srep04742, 5 P., (2014)	5	D.V. Gruznev, L.V. Bondarenko, A.V. Matetskiy, A.A. Yakovlev, A.Y. Tupchaya, S.V. Ereemeev, E.V. Chulkov, Jyu-Pin Chou, Ching-Ming

					Wei, Ming-Yu Lai, Yuh- Lin Wang, A.A. Saranin
18.	Atomic structure and electronic properties of In/Si(111)2x2 surface	статья	Physical Review B, Vol. 89, Iss. 15, P.155310-5. (2014)	5	J.P. Chou, C.M. Wei, Y.L. Wang, D.V. Gruznev, L.V. Bondarenko, A.V. Matetskiy, A.Y. Tupchaya, A.A. Saranin
19.	Structure of the Co/Si(111) $\sqrt{13}\times\sqrt{13}$ surface revisited	статья	Surface Science, Vol.625, P.57-63, (2014)	7	D.A. Olyanich, T.V. Utas, A.A. Alekseev, V.G. Kotlyar, A. A. Saranin.
20.	Size distributions of fullerene surface clusters	статья	Applied Surface Science, Vol. 307, P.46-51, (2014)	6	N.I. Sibirev, V.G. Dubrovskii, A.V. Matetskiy, L.V. Bondarenko, D.V. Gruznev, A.A. Saranin
21.	Electrical conductivity of reconstructed Si(111) surface with sodium-doped C ₆₀ layers	статья	Applied Physics Letters, Vol. 106, P. 011603-4, (2015)	4	D.A. Tsukanov, M.V. Ryzhkova, E.A. Borisenko, A.A. Saranin
22.	Electronic band structure of Tl/Sn atomic sandwich on Si(111)	статья	Physical Review B, Vol. 91, P. 035421-7, (2015)	7	D.V. Gruznev, L.V. Bondarenko, A.V. Matetskiy, A.Y. Tupchaya, A.A. Alekseev, C.R. Hsing, C.M. Wei, S.V. Eremeev, A.A. Saranin
23.	Magic C ₆₀ islands forming due to moiré interference between islands and substrate	статья	Surface Science, Vol. 635, P.94-98, (2015)	5	D.A. Olyanich V.V. Mararov, T.V. Utas, O.A. Utas, D.V. Gruznev,. Saranin
24.	Dynamics of the artificially created vacancies in the monomolecular C ₆₀ layers	статья	Surface Science, Vol. 637-638, P. 5-10, (2015)	6	D.A. Olyanich, T.V. Utas, A.A. Saranin
25.	Tailoring of spin-split metallic surface-state bands on silicon	статья	Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Vol. 201, P.81-87, (2015)	7	D.V. Gruznev, A.A. Saranin
26.	СТМ-наблюдение сверхтонких эпитаксиальных пленок CoSi ₂ (111), выращенных при высокой температуре	статья	ЖТФ, Т. 85, вып. 10, С. 94-100, (2015)	7	А.А. Алексеев, Д.А. Олянич, Т.В. Утас, В.Г. Котляр, А.А. Саранин
27.	Incommensurate superstructure in heavily doped fullerene layer on Bi/Si(111) surface	статья	The Journal of Chemical Physics, Vol.143, P.074707-6, (2015)	6	D.V. Gruznev, L.V. Bondarenko, A.Y. Tupchaya, A.V. Matetskiy, A.A. Saranin
28.	Self-assembled C ₆₀ layers on incommensurate Cu/Si(111)'pseudo-5×5' surface	статья	Surface Science, Vol.642, P.6-10, (2015)	5	D.A. Olyanich, V.V. Mararov, T.V. Utas, A.A. Saranin
29.	Direct observation of a gap opening in topological interface states of MnSe/Bi ₂ Se ₃ heterostructure	статья	Applied Physics Letters, Vol. 107, No.9, P.091604-4, (2015)	4	A.V. Matetskiy, I.A. Kibirev, T. Hirahara, S. Hasegawa, A.A.

					Saranin
30.	Two-dimensional superconductor with a giant Rashba effect: One-atom-layer Tl-Pb compound on Si(111)	статья	Physical Review Letters, Vol.115, Iss.14, P. 147003(5), (2015)	5	A.V. Matetskiy, S. Ichinokura, L.V. Bondarenko, A.Y. Tupchaya, D.V. Gruznev, A.A. Saranin, R. Hobara, A. Takayama, and S. Hasegawa
31.	Atomic structure and electronic properties of the two-dimensional (Au,Al)/Si(111)2x2 compound	статья	Physical Review B, Vol. 92, P.245407-7, (2015)	7	D.V. Gruznev, L.V. Bondarenko, A.V. Matetskiy, A.Y. Tupchaya, E.N. Chukurov, C.-R. Hsing, C.-M. Wei, S.V. Eremeev, A.A. Saranin
32.	Synthesis of two-dimensional Tl_xBi_{1-x} compounds and Archimedean encoding of their atomic structure	статья	Scientific Reports, Vol.6, Article number:19446 doi:10.1038/srep19446, 9 P, (2016)	9	Dimitry V. Gruznev, Leonid V. Bondarenko, Andrey V. Matetskiy, Alexey N. Mihalyuk, Alexandra Y. Tupchaya, Oleg A. Utas, Sergey V. Eremeev, Cheng-Rong Hsing, Juh-Pin Chou, Ching-Ming Wei, Alexander A. Saranin
33.	Low-temperature one-atom-layer $\sqrt{7} \times \sqrt{7}$ -In phase on Si(111)	статья	Surface Science, Vol.649, P. 14-19, (2016)	6	A.N. Mihalyuk, A.A. Alekseev, C.R. Hsing, C.M. Wei, D.V. Gruznev, L.V. Bondarenko, A.V. Matetskiy, A.Y. Tupchaya, A.A. Saranin
34.	Магниторезистивные свойства наноструктурированных магнитных металлов, манганитов и магнитных полупроводников	статья	ЖТФ, Т. 86, вып. 2, С. 78-84, (2016)	7	Н.И. Солин, Л.Н. Ромашев, С.В. Наумов, А.А. Саранин, А.В. Зотов, Д.А. Олянич, В.Г. Котляр, О.А. Утас
35.	Bismuth–indium two-dimensional compounds on Si(111) surface	статья	Surface Science, Vol.651, P.105-111, (2016)	7	N.V. Denisov, A.A. Alekseev, O.A. Utas, S.G. Azatyan, A.A. Saranin
36.	Adsorption and self-assembly of fullerenes on Si(111) $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ -Ag: C_{60} versus C_{70}	статья	Surface Science, (2016), Vol.653, P.138-142.	5	D.A. Olyanich, V.V. Mararov, T.V. Utas, A.V. Zotov, A.A. Saranin
37.	Growth and characterization of van-der-Waals heterostructures formed by the topological insulator Bi_2Se_3 and the trivial insulator $SnSe_2$	статья	Applied Physics Letters, (2016), Vol. 109, Iss. 2, P. 021606-4	4	A.V. Matetskiy, I.A. Kibirev, A.V. Zotov, A.A. Saranin
38.	Molecular simulations of C_{60} self-assembly on metal-adsorbed Si(111) surfaces	статья	J.Vac.Sci.Technol. B, (2016), Vol.34, No.5, P. 051806-6.	6	O.A. Utas, D.A. Olyanich, V.V. Mararov, T.V. Utas, A.V. Zotov, A.A. Saranin
39.	Observation of superconductivity	статья	Journal of the Surface	6	S. Ichinokura, R.

	on the Rashba-type surface reconstruction (Tl, Pb)/Si(111) by in situ electrical transport measurements		Science Society of Japan (JSSSJ), (2016), Vol. 37, No.8, P. 363–368.		Hobara, A. Takayama, S. Hasegawa, A.V. Matetskiy, L.V. Bondarenko, A.Y. Tupchaya, D.V. Gruznev, A.V. Zotov, A.A. Saranin
40.	Comparative STM analysis of C ₆₀ and C ₇₀ fullerene adsorption sites on pristine and Al-modified Si(111)7x7 surfaces	статья	J.Vac.Sci.Technol. A, (2016), Vol.34, No.6, P.061402-5	5	V.V. Mararov, D.V. Gruznev, L.V. Bondarenko, A.Y. Tupchaya, A.V. Zotov, A.A. Saranin
41.	Scanning tunneling microscopy study of the early stages of epitaxial growth of CoSi ₂ and CoSi films on Si(111) substrate: Surface and interface analysis	статья	Thin Solid Films, (2016), Vol. 619, P. 153-159	7	V.G. Kotlyar, A.A. Alekseev, D.A. Olyanich, T.V. Utas, A.V. Zotov, A.A. Saranin
42.	One-atom-layer 4x4 compound in (Tl, Pb)/Si(111) system	статья	Surface Science, (2017), V. 657 P. 63-68	6	A.N. Mihalyuk, C.R. Hsing, C.M. Wei, D.V. Gruznev, L.V. Bondarenko, A.Y. Tupchaya, A.V. Zotov, A.A. Saranin
43.	C ₇₀ self-assembly on In- and Tl-adsorbed Si(111)√3x√3-Au surfaces: Effect of non-spherical fullerene shape	статья	Surface Science, (2017), V. 656 P. 1-6	6	D.A. Olyanich, V.V. Mararov, T.V. Utas, A.V. Zotov, A.A. Saranin
44.	2D Tl-Pb compounds on Ge(111) surface: atomic arrangement and electronic band structure	статья	J.Phys.: Condens.Matter, (2017), Vol. 29, No.3, P.035001-9.	9	D.V. Gruznev, L.V. Bondarenko, A.Y. Tupchaya, S.V. Ereemeev, A.N. Mihalyuk, J.P. Chou, C.M. Wei, A.V. Zotov, A.A. Saranin
45.	Growth of layered superconductor β-PdBi ₂ films using molecular beam epitaxy	статья	Applied Surface Science, (2017), Vol. 401, P. 142-145.	4	N.V. Denisov, A.V. Matetskiy, A.V. Tupkalo, A.V. Zotov, A.A. Saranin
46.	Superconductivity in thallium double atomic layer and transition into an insulating phase intermediated by a quantum metal state	статья	2D Materials, (2017), Vol. 4, No.2, P.025020-10.	10	S. Ichinokura, L.V. Bondarenko, A.Y. Tupchaya, D.V. Gruznev, A.V. Zotov, A.A. Saranin, S. Hasegawa

Автор:

Зотов А.В.

Ученый секретарь ИАПУ ДВО РАН:

Змеу С.Б.

