

Отзыв

об автореферате диссертации 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»,**

представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Быстрое развитие современной науки и техники требует поиска и внедрения новых конструкционных материалов, новой элементной базы для микроэлектроники, использования новых физических эффектов для более эффективной работы. Поиск перспективных соединений для такого использования невозможен без использования современных расчетных методов, основанных на функционале электронной плотности и его расширениях или методах молекулярной динамики. Такие подходы позволяют экономить время и производить предварительный отсев и анализ для выявления наиболее перспективных соединений. Именно этому и посвящена данная работа. В своей работе Бегунович Л.В. использовала современные подходы к описанию электронных и магнитных свойств соединений: приближение электронной плотности DFT и метод гибридного функционала, позволяющий учесть электронные корреляции в узких зонах переходных металлов, для поиска новых материалов и предсказания их свойств.

С учетом изложенного, **актуальность** диссертационной работы Бегунович Л.В., посвященной исследованию новых перспективных материалов с помощью современных зонных методов, сомнений не вызывает.

Несомненна и **научная новизна** работы, где были исследованы влияние интерфейса на транспортные и магнитные свойства слоистых соединений и внедрение атомов металлов в органические соединения на их транспортные свойства. В качестве объектов исследования были выбраны еще не синтезированные соединения: это гетерослой VTe_2 на поверхности графена, которые могут быть использованы в качестве новой элементной базы для магнитной записи информации, гетероструктуры на основе сверхпроводника $FeSe$ на подложке $SrTiO_3$ с дополнительным слоем Se и дефектами подложки, и металлорганические комплексы на основе тетраоксо[8]циркуленов, допированных атомами металлов. Несомненно, полученный автором результат найдет широкое применение для дальнейшего синтеза и исследования свойств данных перспективных материалов.

Научная и практическая ценность работы заключается в том, что были показаны: наличие 100% спиновой поляризации в системе VTe_2 на поверхности

графена, что делает ее перспективной для применения в спинтронике и системах хранения информации; показано влияние дефектов на магнитные и транспортные свойства FeSe на подложке SrTiO_3 , показана возможность создания хороших металлов на основе органических комплексов, допированных атомами Li, Na и Ca.

Вместе с тем из автореферата Бегунович Л.В., неясно, какой конкретно функционал (PBE или гибридный) использовался в каждом случае; почему при исследовании гетероструктур VTe_2 на поверхности графена и FeSe/Se/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?

Указанные замечания не снижают общего хорошего впечатления о диссертационной работе, которая выполнена на достаточно высоком теоретическом уровне. Все результаты и выводы диссертационной работы хорошо обоснованы и опубликованы в международных и российских научных журналах, входящих в перечень ВАК, после строгого рецензирования, что доказывает и их **достоверность**, и их соответствие мировому научному уровню.

Актуальность, новизна и значение полученных в рассматриваемой работе результатов полностью отвечают требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Бегунович Людмила Витальевна, без сомнения заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

с.н.с. лаборатории оптики металлов

к.ф.-м.н.

Шориков А.О.

