

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Огородникова Ильи Игоревича «Рентгеновская фотоэлектронная дифракция и голография поверхностей слоистых кристаллов халькогенидов титана и висмута», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 □ Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Огородникова И.И. посвящена изучению атомной структуры поверхности монокристаллических твердых тел. Определение структурных параметров и визуализация атомной структуры поверхности на глубину несколько нанометров проведены современными и в настоящее время активно развивающимися методами рентгеновской фотоэлектронной дифракции (РФД) и фотоэлектронной голографии (ФГ). В работе объединены два эти достаточно известных метода, что позволило воспользоваться достоинствами каждого из них и компенсировать их недостатки. Автору удалось создать единый подход, объединяющий методы рентгеновской фотоэлектронной дифракции и фотоэлектронной голографии. Это является весомым вкладом в развитие

методики структурного анализа поверхности и определяет **практическую ценность работы**. Работа, несомненно, обладает **актуальностью и новизной**.

В работе Огородникова И.И. исследованы весьма интересные объекты - монокристаллы слоистых халькогенидов TiX_2 (X: Se, S) и Bi_2X_3 (X: Se, Te). Благодаря своей характерной слоистой структуре, формирующейся за счет ионно-ковалентных и ванн-дер-ваальсовских взаимодействий, эти материалы находят широкое практическое применение.

Полученные в работе результаты **достоверны**, так как они получены в ходе высококачественных экспериментов и подтверждены достаточно строгими расчетами. Полученные результаты не противоречат имеющимся представлениям о структуре и свойствах исследованных объектов. Сделанные выводы достаточно строго **обоснованы**.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и библиографического списка использованной литературы из 170 наименований. Диссертация изложена на 172 странице, включает 70 рисунков и 10 таблиц.

Стоит отметить достаточно большой объем работы. При этом упрекать в этом автора нельзя – объем обусловлен обширностью материала. Оппонент отмечает хорошее качество оформления работы, доходчивый стиль изложения. Особенно хороши рисунки, снабженные подробными пояснениями. Видно, что над текстом и иллюстрациями автор вдумчиво поработал.

Во введении сформулирована цель и конкретные задачи работы, дана ее краткая характеристика, сформулированы положения, выносимые на защиту, обоснованы новизна и практическая ценность результатов работы, отражен личный вклад соискателя, приведена информация о научной апробации и публикациях автора по теме диссертации.

Первая глава диссертации является литературным обзором. Дано описание текущего состояния методов РФД и ФГ. Проведен анализ имеющихся в ли-

тературе экспериментальных и теоретических исследований, проанализирован опыт использования РФД и ФГ для изучения различных поверхностных структур и интерфейсов. На основе обзора сформулированы задачи работы.

Во второй главе дано описание методики эксперимента и используемых приборов, методов подготовки образцов, методов обработки экспериментальных данных. Автор продемонстрировал достаточно высокую квалификацию экспериментатора, а также владение современными методами интерпретации довольно сложных экспериментальных данных.

Следует особо отметить, что автором создана оригинальная компьютерная программа XPDProcessor для обработки экспериментальных данных РФД и ФГ, позволяющая одновременно использовать имеющиеся программные продукты *EDAC* и *SPEA-MEM*. Эта программа теперь, вероятно, будет использоваться другими исследователями научной группы, что позволит им быстрее продвигаться в их научных исследованиях.

В третьей главе приведены результаты исследования структуры поверхности хорошо ранее изученного слоистого дихалькогенида титана $1T\text{-TiSe}_2$. На этом примере проведена отработка методики исследований, которая применена в дальнейшем для исследования более сложных объектов. Надо отметить, что автор получил несколько интересных новых результатов, например, продемонстрировано релаксационное сжатие поверхностных слоев и ван-дер-Ваальсовой щели и отклонение поверхности $1T\text{-TiSe}_2$ от базовой плоскости (001).

В четвертой главе приведены результаты РФД- и ФГ-исследований атомной структуры чистых поверхностей монокристаллов $(111)\text{Bi}_2\text{Te}_3$ и $(111)\text{Bi}_2\text{Se}_3$. Уточнены структурные положения атомов в приповерхностных областях кристалла. Точность измерений удалось повысить за счет использования синхротронного излучения с варьируемой длиной волны и тороидального

анализатора, позволяющего достаточно быстро получать угловые зависимости интенсивности дифракции в области телесных углов 2θ .

В пятой главе решается еще более сложная задача – применение методов РФД и ФГ для изучения элементов внедрения (замещения) в структуре халькогенидов, а также адсорбционных структур на их поверхностях. Исследованы системы: (111) Bi_2Se_3 (In10%) и $\text{Fe,Co}/(111)\text{Bi}_2\text{Te}_3, \text{Bi}_2\text{Se}_3$. Определены позиций внедренных или адсорбированных атомов металлов в решетке слоистых кристаллов халькогенидов. В случае адсорбции железа на (111) Bi_2Se_3 впервые реализован метод фотоэлектронной голографии с разделением химических состояний элементов.

В заключении кратко изложены результаты диссертационной работы.

Список использованной литературы охватывает основной круг отечественных и зарубежных публикаций по теме диссертационного исследования и демонстрирует достаточное знакомство автора с проблемой

Работа содержит и некоторые недостатки:

1. Термины «прямая задача» и «обратная задача» употребляются автором в смысле, противоположном общепринятому. Прямой задачей автор называет определение структуры объекта по спектральным данным. В спектроскопии же прямой задачей считается расчет спектров по заданным параметрам объекта, а определение структуры объекта из спектральных данных принято называть обратной задачей.
2. В главе 3 автор пишет: «Установлено, что кроме линий основных элементов (Ti и Se) в РФЭС-спектрах присутствуют малоинтенсивные максимумы от $\text{O}1s$ -кислорода и $\text{C}1s$ -углерода (рисунке 3.3)». При этом на рис. 3.3. приведен обзорный спектр, содержащий большое количество пиков. Пики кислорода и углерода на нем не отмечены.

3. Используемый автором пакет (EDAC) использует *muffin-tin* потенциал. Использование *muffin-tin* потенциала может, в принципе, приводить к рассеянию электронов на нефизических скачках потенциала, присутствующих в этой модели. Не могут ли такие не существующие в природе рассеяния повлиять на формируемую теоретическую дифракционную картину?
4. В главе 3 автор исследует два различных R-фактора (формулы 3.1 и 3.2) и приходит к выводу, что один из них предпочтительнее. Однако в гл. 4 используется еще один R-фактор, (4.1), по словам автора, наиболее удобный и простой. Почему надо было менять R-фактор?
5. В гл. 4. упоминается программа для обработки результатов эксперимента, написанная автором и говорится, что текст программы находится в приложении к диссертации. В экземпляре оппонента такое приложение отсутствует.
6. Автор порой чересчур увлекается англицизмами, а также прямым использованием англоязычных терминов. Почему сегнетоэлектрическую пленку надо называть ферроэлектрической, а узловую плоскость нодалной плоскостью? Неужели пассажи вроде «*vacancies on the selenium sites*», «*three conjugate hexagons*» или «*in forward direction*» утратят какие-то тонкости смысла, если написать то же самое по-русски?

Эти замечания не влияют на общую положительную оценку работы, представляющей собой законченное, логически целостное научное исследование, выполненное на высоком научном и профессиональном уровне. Материалы работы прошли апробацию на многочисленных Международных и Всероссийских конференциях и достаточно полно опубликованы, в том числе в международных журналах высокого уровня. Всего по материалам диссертации опубликовано 16 статей, в том числе 5 статей в рецензируемых журналах согласно перечню ВАК РФ.

Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Таким образом, диссертация Огородникова Ильи Игоревича отвечает п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» в редакции Постановления Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г., предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Огородников Илья Игоревич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 □ Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент, профессор кафедры физики федерального государственного бюджетного учреждения высшего профессионального образования «Ростовский государственный университет путей сообщения», доктор физ.-мат. наук, 01.04.07 □ физика конденсированного состояния

Кочур Андрей Григорьевич

344038, Россия, г. Ростов-на-Дону, пл. Ростовского Стрелкового Полка Народного Ополчения, д. 2, РГУПС;
тел./факс: +7(863) 255-32-83;
e-mail: agk@rgups.ru
06.11.2015 г.

Подпись Кочур А. Г.
УДОСТОВЕРЯЮ
Начальник управления делами
ФГБОУ ВПО РГУПС
"06" 11 2015 г.



Т.М. Канина