

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.285.02
НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ «УРАЛЬСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ ПЕРВОГО ПРЕЗИДЕНТА РОССИИ Б.Н.
ЕЛЬЦИНА», МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 04.12.2015 г. № 20

О присуждении Огородникову Илье Игоревичу, гражданство Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Рентгеновская фотоэлектронная дифракция и голография поверхностей слоистых кристаллов халькогенидов титана и висмута» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния принята к защите 25 сентября 2015 г., протокол № 13 диссертационным советом Д 212.285.02 на базе ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России, 620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19; созданным приказом Минобрнауки России № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель, Огородников Илья Игоревич, 1987 года рождения.

В 2010 году окончил ГОУ ВПО «Уральский государственный технический университет – УПИ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по специальности «Электроника и автоматика физических установок», в 2013 г. окончил очную аспирантуру ФГАОУ ВПО «Уральский

федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния; работает в должности младшего научного сотрудника лаборатории квантовой химии и спектроскопии ФГБУН Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук (г. Екатеринбург), Федеральное агентство научных организаций.

Диссертация выполнена на кафедре «Экспериментальная физика» Физико-технологического института ФГАОУ ВПО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Научный руководитель – доктор химических наук, **Кузнецов Михаил Владимирович**, ФГБУН Институт химии твердого тела Уральского отделения Российской академии наук, зам. директора по научной работе.

Официальные оппоненты:

Галахов Вадим Ростиславович, доктор физико-математических наук, ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН (г. Екатеринбург), лаборатория рентгеновской спектроскопии, главный научный сотрудник;

Кочур Андрей Григорьевич, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВПО «Ростовский государственный университет путей сообщения» (г. Ростов-на-Дону), кафедра физики, профессор,

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – ФГБУН Физико-технический институт Уральского отделения Российской академии наук, г. Ижевск – в своем положительном заключении, подписанном Гильмутдиновым Фаатом Залалутдиновичем, кандидатом физико-математических наук, заведующим отделом физики и химии поверхности; Михайловой Софьей Сергеевной, кандидатом физико-математических наук, старшим научным сотрудником

отдела структурно-фазовых превращений, указала, что диссертационная работа Огородникова И.И. является завершенным научным исследованием, а ее актуальность не вызывает сомнений. Автор диссертации проделал огромную исследовательскую работу, в которой он продемонстрировал прекрасную теоретическую подготовку, знание современных численных методов расчета и математических методов обработки эксперимента, а также проявил себя как высококвалифицированный экспериментатор. Им получен ряд приоритетных результатов, которые имеют фундаментальную и практическую значимость.

Диссертация отвечает требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, а её автор, Огородников Илья Игоревич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Соискатель имеет 25 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 16 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 5. Другие публикации по теме диссертации представлены в виде 8 статей, опубликованных в сборниках материалов международных конференций (7), межвузовском сборнике научных трудов (1); 3 тезисов докладов на всероссийских конференциях.

Общий объем опубликованных работ – 7,19 п.л., авторский вклад – 1,76 п.л.

Наиболее значительные научные работы по теме диссертации:

1. Огородников, И.И. Атомная структура поверхностного слоя 1T-TiSe₂ по данным фото- и Оже-электронной голографии / **И.И. Огородников**, А.С. Ворох, А.Н. Титов, М.В. Кузнецов // Письма в ЖЭТФ. 2012. Т. 95, №7. С. 414-422 (0,56 п.л./0,14 п.л.).

2. Ogorodnikov, I.I. Characterization of 1T-TiSe₂ surface by means of STM and XPD experiments and model calculations / M.V. Kuznetsov, **I.I. Ogorodnikov**,

A.S. Vorokh, A.S. Rasinkin, A.N. Titov // Surf. Sci. 2012. V. 606, №23-24. P. 1760-1770 (0,69 п.л./0,14 п.л.).

3. Разинкин, А.С. Структурные дефекты на поверхности 1Т-TiSe₂: Эксперимент и модельные расчеты фотоэлектронной дифракции / А.С. Разинкин, **И.И. Огородников**, А.Н. Титов, М.В. Кузнецов // Известия РАН. Сер. физическая. 2012. Т. 76, № 9. С. 1166-1169 (0,25 п.л./0,06 п.л.).

4. Кузнецов, М.В. Рентгеновская фотоэлектронная дифракция и фотоэлектронная голография как методы исследования локальной атомной структуры поверхности твердых тел. Обзор / М.В. Кузнецов, **И.И. Огородников**, А.С. Ворох // Успехи химии. 2014. Т. 83. С. 13-37 (1,56 п.л./0,52 п.л.).

5. Kuznetsov, M.V. Atomic structure of Bi₂Se₃ and Bi₂Te₃ (111) surfaces probed by photoelectron diffraction and holography / M.V. Kuznetsov, L.V. Yashina, J. Sánchez-Barriga, **I.I. Ogorodnikov**, A.S. Vorokh, A.A. Volykhov, R.J. Koch, V.S. Neudachina, M.E. Tamm, A.P. Sirotina, A.Yu. Varykhalov, G. Springholz, G. Bauer, J.D. Riley, O. Rader // Phys. Rev. B. 2015. V. 91, №8. P. 085402 (1,56 п.л./0,03 п.л.).

На автореферат поступили положительные отзывы:

1. Тетерина Юлия Александровича, доктора физико-математических наук, ведущего научного сотрудника лаборатории прецизионной спектроскопии ФГБУ Национальный Исследовательский Центр «Курчатовский институт» (г. Москва). Без замечаний.

2. Кащенко Михаила Петровича, доктора физико-математических наук, профессора, заведующего кафедрой физики ФГБОУ ВПО «Уральский государственный лесотехнический университет». Без замечаний.

3. Кузнецовой Татьяны Владимировны, кандидата физико-математических наук, старшего сотрудника лаборатории рентгеновской

спектроскопии ФГБУН Института физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук. Без замечаний.

4. Усачёва Дмитрия Юрьевича, кандидата физ.-мат. наук, доцента кафедры электроники твердого тела ФГБОУ ВПО «Санкт-Петербургского государственного университета» (г. Санкт-Петербург). Без замечаний.

5. Бухтиярова Валерия Ивановича, член-корреспондента РАН, доктора химических наук, директора ФГБУН Института катализа имени Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук (г. Новосибирск). Замечания:

1. Текст автореферата не свободен от опечаток (см. стр. 3, 7, 21), жаргонизмов (например, «слэб») и произвольных нотификаций (например, $Se(S)p$ вместо $Se4p$ ($S3p$), использованной в тексте манускрипта). 2. Соискатель достаточно произвольно использует понятие «поверхность» в нескольких различных по сути значениях: не собственно на поверхности, а в слоях, непосредственно примыкающих к ней (стр. 3); несколько монослоев поверхности (стр. 4); {железо} проникает под поверхность халькогенида (стр. 6); слои находятся под поверхностью (стр. 15). 3. В описании приготовления образцов $Fe/(111)Bi_2Te_3$ вызывает сомнения корректность использования слова «адсорбция» для осаждения и взаимодействия атомов железа с поверхностью халькогенида висмута (см. п. 4). 4. Для системы $Fe/(111)Bi_2Te_3$ из данных РФЭС делается вывод о частичном замещении висмута железом в структуре халькогенида. При этом, из соотношения интенсивностей поверхностной и объемной компонент спектра $Bi4f$ следует, что такому вытеснению подвержена большая часть висмута в поверхностном слое. Однако, предполагаемые атомные модели поверхности $Fe/(111)Bi_2Te_3$ (приведенные на рис. 8 т 9) противоречат первоначальному описанию и отвечают, скорее, модели внедрения железа по междоузлиям с относительно небольшим смещением атомов висмута с

исходных позиций. В таком случае, было бы желательно предложить альтернативный вариант объяснения расщепления линии $\text{Bi}4f$.

6. Фетисова Андрея Вадимовича, доктора химических наук, ведущего научного сотрудника лаборатории статики и кинетики процессов ФГБУН Института металлургии Уральского отделения Российской академии наук. Замечания: Различие методов рентгеновской фотоэлектронной дифракции и голографии в автореферате не достаточно акцентировано, что создает некоторые трудности для понимания результатов исследования. Понимание приходит лишь после прочтения непосредственно диссертационной работы.

7. Терещенко Олега Евгеньевича, доктора физико-математических наук, доцента, старшего научного сотрудника лаборатории молекулярно-лучевой эпитаксии полупроводниковых соединений A_3B_5 ФГБУН Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук (г. Новосибирск). Замечания: из второго вывода не ясно, почему автор ожидал обнаружить иное строение верхнего пятислойного блока на поверхности $\text{Bi}_2\text{Se}(\text{Te})_3$ от его же строения в объеме, принимая во внимание слабую межблочную связь ван-дер-Ваальса? Откуда взялась гипотеза образования бислоев висмута на поверхности (111) Bi_2Se_3 при сколе в вакууме и необходимость её опровержения, также не ясна.

8. Ионова Андрея Михайловича, доктора физико-математических наук, профессора, ведущего научного сотрудника лаборатории спектроскопии поверхности полупроводников ФГБУН Института физики твердого тела Российской академии наук (г. Черноголовка). Замечания: 1. В автореферате можно найти неточности и не вполне понятные места. Так, указывается, что точность определения позиций атомов с помощью фотоэлектронной дифракции – примерно 0.02 \AA , а в таблице 1 типичный разброс порядка 0.05 \AA . Неясно, с чем связано изменение симметрии для картин РФД $\text{Te}4d$ при 759 эВ для

эксперимента и расчета. 2. При осаждении железа на чистом сколе (111) Bi_2Te_3 удалось получить картину дифракции и делается утверждение, что эти атомы расположены упорядоченно (Рисунок 7). Было бы интересно узнать, влияет ли на упорядочение изменение температуры при отогреве от 200К при переносе в камеру анализа, или это происходит непосредственно при осаждении железа.

9. Турищева Сергея Юрьевича, доктора физико-математических наук, доцента кафедры физики твердого тела и наноструктур ФГБОУ ВПО «Воронежский государственный университет». Без замечаний.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их широкой известностью своими достижениями и высокой научной компетентностью в области электронной спектроскопии и физики поверхности, близостью тематики проводимых ими исследований и темы диссертационной работы.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

Разработаны:

- методика исследования структуры поверхности методами рентгеновской фотоэлектронной дифракции (РФД) и фотоэлектронной голографии (ФГ), которую можно применять к сложным объектам – слоистым кристаллам;

- программы XPDPanel и XPDProcessor, предназначенные для обработки и анализа данных по рентгеновской фотоэлектронной дифракции и голографии;

установлено, что

- метод фотоэлектронной голографии как составная часть рентгеновской фотоэлектронной дифракции является эффективным инструментом при анализе атомной структуры поверхности твердых тел. 3D-реконструкция методами ФГ и РФД атомной структуры поверхности монокристаллических материалов

осуществляется на глубину $\sim 20 \text{ \AA}$ с точностью определения межатомных расстояний лучше 0.05 \AA ;

- имеет место структурная деформация верхних слоев поверхности (001) $1T\text{-TiSe}_2$. Это связано с релаксационными эффектами на поверхности, структурными дефектами и отслаиванием верхнего Se-Ti-Se структурного блока от матрицы кристалла. Деформация решетки верхнего структурного слоя $1T\text{-TiX}_2$ (X: S, Se) в виде растяжения в базисной плоскости или сжатия вдоль нормали к поверхности приводит к снижению коэффициента c_0/a_0 , что объясняет наблюдаемую ARPES энергетическую щель между Se(S) p и Ti $3d$ зонами;

- последовательность упаковки поверхностных слоев халькогенидов соответствует таковой в объеме, т.е. на поверхности расположен пятислойный структурный блок с атомами халькогена (Se, Te) в первом слое. Существующая гипотеза образования бислоев висмута на поверхности (111) Bi_2Se_3 при сколе в вакууме неверна. Релаксация поверхностных слоев (111) Bi_2Te_3 и (111) Bi_2Se_3 колеблется в пределах нескольких процентов, что укладывается в рамки точности метода;

- индий в решетке Bi_2Se_3 расположен на позициях висмута; межслоевые расстояния в первом структурном блоке слоистого халькогенида $\text{Bi}_2\text{Se}_3(\text{In}10\%)$ составляют: $d_1=1.60\pm 0.05 \text{ \AA}$, $d_2=2.00\pm 0.05 \text{ \AA}$, $d_3=2.00\pm 0.05 \text{ \AA}$ и $d_4=1.50\pm 0.05 \text{ \AA}$, ширина первой ван-дер-Ваальсовой щели $vdW=2.40\pm 0.05 \text{ \AA}$;

- в результате адсорбции Fe на поверхность (111) Bi_2Te_3 (в вакууме) часть атомов железа проникает под поверхность халькогенида висмута и занимает междоузельные позиции под первым и вторым слоями теллура. Предложенная на основе РФД и ФГ данных модель поверхностного интерфейса Fe/(111) Bi_2Te_3 хорошо согласуется с результатами квантовохимических расчетов;

определены параметры структуры ряда кристаллов слоистых халькогенидов – (001) TiSe_2 , (111) Bi_2Te_3 , (111) Bi_2Se_3 , $\text{Bi}_2\text{Se}_3(\text{In}10\%)$ и адсорбционных структур – Co, Fe на (111) Bi_2Te_3 , (111) Bi_2Se_3 .

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что результаты диссертационного исследования вносят вклад и расширяют представления о структуре поверхности слоистых материалов;

применительно к проблематике диссертации эффективно использован комплекс методов рентгеновской фотоэлектронной дифракции и голографии.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что комплексный метод рентгеновской фотоэлектронной дифракции (РФД) и фотоэлектронной голографии (ФГ) может быть применен для изучения поверхностей монокристаллов, эпитаксиальных пленок, адсорбционных структур и интерфейсов на поверхностях монокристаллов. Метод обладает очевидными преимуществами перед традиционными методами: селективностью к структурным позициям атомов разного сорта и отличающимся химическим формам атомов одного сорта;

кристаллы (111) Bi_2Te_3 и (111) Bi_2Se_3 относятся к классу топологических изоляторов и могут использоваться в устройствах спинтроники, адсорбция на поверхности “магнитных” металлов может оказывать влияние на электронные и спиновые свойства материала.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

- результаты получены на сертифицированном оборудовании;
- воспроизводимость, согласованность и непротиворечивость полученных результатов друг с другом и с известными литературными данными.

Личный вклад соискателя состоит в: постановке целей и задач исследований совместно с научным руководителем; участии в проведении

экспериментов по сканирующей туннельной микроскопии, рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, рентгеновской фотоэлектронной дифракции и голографии; создании программного обеспечения для автоматизации работы с экспериментальными и расчетными данными по РФД и ФГ; обработке экспериментальных данных; проведению теоретических расчетов с помощью программ EDAC и SPEA-MEM; обсуждению результатов и подготовке их к публикации при участии научного руководителя; подготовке основных публикаций по выполненной работе; формулировке выводов и защищаемых положений диссертации.

На заседании 04 декабря 2015 г. диссертационный совет принял решение присудить Огородникову И.И. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 19, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

И.о. председателя диссертационного совета,
член совета (приказ ректора УрФУ
от 01.12.2015 г., № 7143/04),
д-р физ.-мат. наук, проф.



Мазуренко Владимир Гаврилович

Ученый секретарь
диссертационного совета



Ищенко Алексей Владимирович

04 декабря 2015 г.