

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Пономарева Дмитрия Андреевича «Модельно-независимый метод определения локального атомного строения с разрешением по глубине в многослойных металлических наногетероструктурах с низкой контрастностью», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Д.А. Пономарева посвящена разработке нового экспериментального метода, позволяющим исследовать с разрешением по глубине локальную атомную структуру неоднородных слоевых систем, компоненты которых обладают низкой контрастностью для рентгеновского излучения. В работе описан математический алгоритм разработанного автором метода. Апробация метода на модельной системе позволила определить его погрешность. С помощью этого метода получены данные о локальном атомном строении слоев, интерфейсов и приповерхностной области реальной специально синтезированной мультислойной структуры  $Al_2O_3/Cr(100\text{\AA})/[Fe(8\text{\AA})/Cr(10.5\text{\AA})]_2/Cr(20\text{\AA})$ .

Многослойные наногетероструктуры Fe/Cr – искусственные структуры, обладающие уникальными магнитотранспортными свойствами. Именно на этих объектах П. Грюнбергом и А. Фертом впервые был открыт гигантский магниторезистивный (ГМР) эффект. В последующие годы было опубликовано большое количество работ, посвящённых изучению таких структур. Было показано, что величина ГМР эффекта зависит от дефектности атомной упаковки в межслойном (интерфейсном) пространстве. Однако моделирование этих структур не может в полной мере описать и проанализировать связь строения интерфейсов и величины ГМР эффекта. Для этого необходим прямой экспериментальный метод, позволяющий получить информацию о локальном атомном строении слоев и интерфейсов. Существующие в настоящее время методы позволяют получить либо концентрационный профиль, то есть распределение атомов определённой химической природы в зависимости от расстояния от поверхности исследуемого образца, и данные о степени несовершенства межслойных интерфейсов, либо детальную информацию о локальной атомной структуре, но усредненной по всему объёму образца, доступного для анализа. Эти методы не позволяют выявить особенности атомного упорядочения низкоконтрастных структур, для которых величины, характеризующие взаимодействие компонентов с рентгеновским излучением, имеют близкие значения. Кроме того, для их применения необходима модель, параметры которой итерационным образом подбираются для достижения соответствия экспериментальным данным. Таким образом, тематика обсуждаемой диссертационной работы очевидно актуальна.

Во введении автор обосновывает актуальность разработки нового метода исследования локального атомного строения с разрешением по глубине, необходимость развития алгоритмов обработки спектров рентгеновской рефлектометрии и EXAFS, основанных на методе регуляризации Тихонова, определяет цель и задачи работы, формулирует её научную новизну, научную и практическую ценность, защищаемые

положения. Далее описан личный вклад автора, указаны многочисленные конференции различного уровня, где полученные в работе результаты получили солидную апробацию. Кратко перечислены факторы, которые обеспечили достоверность представляемых в диссертации результатов. Описана структура диссертации, которая состоит из введения, четырёх глав, заключения, библиографического списка из 83 наименований, приложения, всего содержит 124 стр. печатного текста, 38 рисунков и 5 таблиц. Дополнительный список литературы к приложению состоит из 8 наименований.

Первая глава диссертации носит обзорный характер. В ней даны основные понятия и определения, используемые в диссертации. Рассмотрены основные методики синтеза многослойных наногетероструктур, основы рентгеновской рефлектометрии и EXAFS-спектроскопии. Проведен анализ работ, в которых описываются методы исследования, комбинирующие несколько экспериментальных методик. Глава заключена выводами, послужившими основанием для определения цели и задач исследования.

Во второй главе автор описывает алгоритм разработанного метода исследования локального атомного строения многослойной наногетероструктур с разрешением по глубине. Алгоритм состоит из трех этапов. На первом этапе обрабатываются данные рентгеновской рефлектометрии. Результатом обработки является концентрационный профиль исследуемого образца – вероятность найти атом определенного сорта на глубине от поверхности образца. Второй этап алгоритма метода заключается в переходе от угловой зависимости EXAFS-спектроскопии к зависимости от глубины образца. Автор подчеркивает, что этот этап является самым важным, так как именно на нем происходит объединение данных двух независимых экспериментов. На третьем этапе происходит получение информации о локальном атомном строении в виде парциальных парных корреляционных функций. Они получаются при решении обратной задачи EXAFS-спектроскопии методом регуляризации Тихонова. Для этого необходимо выбрать фиксированные точки на нормали к поверхности, направленной внутрь образца.

Третья глава диссертации посвящена апробации разработанного метода на модельной системе  $Al_2O_3/Cr(100\text{\AA})/[Fe(8\text{\AA})/Cr(10.5\text{\AA})]_2/Cr(20\text{\AA})$ . Для этого была построена модель атомной структуры выбранной системы, состоящей из 500000 атомов. На основе этой модели были рассчитаны модельные входные сигналы для разработанного метода. Для проверки устойчивости алгоритма метода к возмущениям на входных данных на модельные спектры флуоресцентного излучения был наложен статистический шум. Разница между зашумленным и чистым сигналом составила 10%. Итогом обработки модельных спектров стала информация о локальном атомном строении на трех разных глубинах в образце. Было показано, что погрешность метода в определении межатомных расстояний для первой и второй координационных сфер составила  $\pm 0.01\text{\AA}$ , для третьей –  $\pm 0.03\text{\AA}$ . Погрешность определения координационных чисел первой координационной сферы, по оценке автора, составляет  $\pm 2$  атома, однако данные табл. 3.1 на стр. 66 позволяют считать, что величина погрешности им несколько завышена.

В четвертой главе описаны результаты экспериментальной апробации предложенного метода на реальной системе  $Al_2O_3/Cr(100\text{\AA})/[Fe(8\text{\AA})/Cr(10.5\text{\AA})]_2/Cr(20\text{\AA})$ . На первом этапе были получены спектры рентгеновской рефлектометрии при трех разных размерах щелей детектора. Это позволило автору выделить зеркальный вклад в спектры рентгеновской рефлектометрии, а также определить толщины всех нанослоев.

На втором этапе автор использовал спектры EXAFS для пяти разных углов выхода флуоресцентного излучения, полученные на станции «ФАЗА» Курчатовского специализированного источника синхротронного излучения «КИСИ-Курчатов» для К-краев поглощения Fe и Cr. Обработка экспериментальных данных позволила получить информацию о локальном атомном строении слоев и интерфейсов исследуемой мультислойной наногетероструктуры. В ходе исследования выявлено наличие оксида  $Cr_2O_3$  на поверхности исследуемого образца.

Достоверность результатов представленной работы обеспечивается использованием современных экспериментальных установок, проверенных экспериментальных методик, эффективных методов решения некорректных задач, вычислительных методов и возможностью экспериментальной проверки результатов.

В работе впервые разработан экспериментальный метод исследования локального атомного строения многослойных низкоконтрастных наногетероструктур с разрешением по глубине. Впервые с помощью данного метода получена информация о локальном атомном строении системы  $Al_2O_3/Cr(100\text{\AA})/[Fe(8\text{\AA})/Cr(10.5\text{\AA})]_2/Cr(20\text{\AA})$ . Эти факты характеризуют новизну работы.

Научная и практическая значимость работы определяется возможностью использования разработанного метода для любых металлических объектов, в том числе гетерогенных наноструктур, компоненты которых проявляют слабую контрастность.

Основные результаты диссертации своевременно опубликованы в ведущих российских и зарубежных журналах, апробированы на конференциях. Для представленной диссертации характерно структурное единство её частей, что обеспечило последовательное, подробное и ясное изложение материала.

При изучении работы у меня возникли несколько вопросов и замечаний.

1. На стр. 42 в первой строке правильнее было написать не « -составляющая z вектора рассеяния, а «проекция вектора рассеяния на нормаль к поверхности, направленную внутрь вещества». В конце этой же страницы вместо выражения «граница поверхности» более корректно писать «где  $z=0$  соответствует положению границы раздела между образцом и вакуумом».
2. На стр. 65 (рис. 22) вызывает недоумение малое количество точек, в которых изучалась модельная атомная структура. Не менее интересны и другие критические точки профиля. Наличие нескольких точек в областях резкого изменения концентрации вплоть до границы интерфейса усилило бы убедительность взаимного соответствия расчётов и модельной структуры. В подписи вертикальной оси можно было бы указать, что это профиль хрома, а не железа.
3. На стр. 70 содержится бездоказательное утверждение, что система со слоями железа толщиной 8 ангстрем обладает максимальным значением МС. На рис. 25 (стр. 72) видно, что величина МС растёт при росте толщины слоёв в интервале 1,2-8 ангстрем. А если взять 9 ангстрем? Поэтому следовало добавить «...из синтезированных нами».

4. На рис. 28 большее, чем на рис. 22, количество точек, однако объяснение происхождения сплошной линии и семи точек на ней проведено недостаточно подробно.

Перечисленные оппонентом недостатки и вопросы носят в основном рекомендательный и уточняющий характер, касаются по большей части оформления работы и не затрагивают по существу содержание, результаты и выводы обсуждаемого исследования. Диссертация Д.А. Пономарёва представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, содержащую остроумное и детально проработанное решение актуальной задачи: разработка нового метода исследования локальной атомной структуры с разрешением по глубине для систем, обладающих низкой контрастностью для рентгеновского излучения. Содержание работы, полученные результаты, выводы и рекомендации соответствуют сформулированным во введении цели и задачам, их обоснованность не вызывает сомнений. Также очевидно соответствие содержания пункту 6 Паспорта специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния. Содержание автореферата в достаточной степени отражает таковое диссертации.

Учитывая вышеперечисленную аргументацию, считаю, что диссертационная работа Пономарева Дмитрия Андреевича «Модельно-независимый метод определения локального атомного строения с разрешением по глубине в многослойных металлических наногетероструктурах с низкой контрастностью» удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, а её автор заслуживает присуждения искомой степени.

Профессор кафедры физики  
обучения физике  
государственного  
педагогического универси  
математических наук

Л.А. Песин

*С отзывом ознакомлен*

*30.03.2018.*

## Сведения об официальном оппоненте

ФИО: Песин Леонид Абрамович

Учёная степень, звание: доктор физико-математических наук, специальность 02.00.04 - физическая химия, профессор

Полное наименование организации: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный гуманитарно-педагогический университет»

Должность: профессор кафедры физики и методики обучения физике

Почтовый адрес: 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 69

Телефон: +7 922 232 11 09

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

### Публикации в сфере исследований, которым посвящена диссертация:

1. Бржезинская М.М., Песин Л.А., Морилова В.М., Байтингер Е.М. Проявление Оже-процессов в C1s сателлитных спектрах одностенных углеродных нанотрубок. // Физика твердого тела, 2012, т. 54, вып. 9, с. 1808-1812.
2. Brzhezinskaya M.M., Morilova V.M., Baitinger E.M., Evsyukov S.E., Pesin L.A. Study of poly (vinylidene fluoride) radiative modification using core level spectroscopy. // Polymer Degradation and Stability, 2014, Vol. 99(1), p. 176-179.
3. Песин Л.А., Андрейчук В.П., Морилова В.М., Грибов И.В., Москвина Н.А., Кузнецов В.Л., Евсюков С.Е., Корякова О.В., Мокрушин А.Д., Егоров Е.В. Неоднородность распределения атомов фтора по глубине при радиационной карбонизации поливинилиденфторида. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2013, № 5, с. 51-57.
4. Сидельникова А.Л., Живулин В.Е., Песин Л.А., Жеребцов Д.А. Распределение остаточного фтора по глубине при электронной бомбардировке пленки поливинилиденфторида // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, 2018, № 1, с. 20-25.
5. Воинкова И.В., Песин Л.А., Волегов А.А., Евсюков С.Е., Грибов И.В., Кузнецов В.Л., Москвина Н.А. Распределение концентрации фтора по глубине при радиационной карбонизации ПВДФ. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2007(8), с. 20-24.

Официальный оппонент

Песин Леонид Абрамович

Учёный секретарь

Учёного совета ЮУрГППУ

Чедуренко Анна Анатольевна