

ОТЗЫВ

официального оппонента о кандидатской диссертации **Чумакова Ратибора Григорьевича «Адсорбция и самоорганизация полярных молекул $C_{60}F_{18}$ на металлических поверхностях»**, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния»

Органическая электроника, в настоящее время являющаяся одной из альтернатив кремниевой электроники, испытывает новые витки в развитии в связи с открытием новых путей синтеза органических молекул, обладающих уникальными свойствами. Использование уже сейчас молекул в различных элементах органической микроэлектроники в перспективе может позволить перейти к одномолекулярным устройствам и технологиям. В связи с этим особое внимание необходимо уделить изучению взаимодействия органических молекул между собой и с подложкой, изучению влияния коллективных эффектов таких систем на свойства интерфейсов и всего устройства в целом. Поэтому проведенное в диссертационной работе Р.Г. Чумакова исследование процессов адсорбции и самоорганизации полярных молекул $C_{60}F_{18}$, как модельных объектов, обладающих высоким дипольным моментом, на металлических поверхностях, несомненно, является важным и **актуальным**.

Текст диссертации состоит из введения, трех глав, выводов и списка используемой литературы, включающего 123 наименования. Общий объем диссертационной работы составляет 115 страниц.

Первая глава работы посвящена обзору литературы, где рассмотрен существующий в настоящее время подход к теоретическому описанию взаимодействия органических молекул с металлическими подложками.

Автор руководствуется выбором модельных объектов исследования, исходя из свойств молекул и соответствующих подложек. Как правильно отмечено в диссертации, важно выбрать молекулы, которые сочетают в себе органические и неорганические свойства. Кроме того, исследуемые объекты должны обладать высокой радиационной, химической и термической стабильностью. Выбранная молекула фторида фуллерена $C_{60}F_{18}$ сочетает в себе углеродный каркас, являющийся аналогом органических молекул, и атомы фтора, активно участвующие в химических связях с металлами. В качестве металлических подложек выбраны базовые грани золота и никеля как максимально инертная и максимально активная поверхности в реакции с молекулярными адсорбатами.

Вторая глава диссертационной работы посвящена описанию используемых в работе экспериментальных методик и установок. В работе были использованы современные поверхностно чувствительные методики: сканирующая туннельная микроскопия/спектроскопия, рентгеновская фотоэлектронная спектроскопия, спектроскопия рентгеновского поглощения в ближней области, а также моделирование с использованием теории функционала плотности.

В третьей главе приведены результаты исследования и их обсуждение. Первая часть этой главы посвящена исследованиям с использованием сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии. Исследования были проведены как для отдельной молекулы $C_{60}F_{18}$ на поверхности монокристалла золота Au(111) при гелиевой температуре, так и для ансамбля самоорганизованных молекул. Сделаны выводы о возможных способах адсорбции молекул, а также их самоорганизации при больших степенях покрытия поверхности.

С помощью рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии и спектроскопии рентгеновского поглощения в ближней области проведен анализ взаимодействия молекул $C_{60}F_{18}$ с поверхностями монокристаллов золота Au(111) и никеля Ni(100). Были сделаны выводы о влиянии адсорбции (физической или химической) молекул на электронную структуру и положение энергетических уровней системы молекула-подложка. Особый интерес вызывает проведенное в диссертационной работе моделирование адсорбции на основе теории функционала плотности, что дает важные физические параметры системы, такие как длина и углы связей, перенос заряда и энергия взаимодействия. В заключительной части третьей главы представлены результаты анализа ориентации молекул относительно подложки монокристалла Ni(100) по ближней тонкой структуре рентгеновских спектров поглощения и сделан вывод об их ортогональности подложке.

Стоит отметить, что значительная часть экспериментальных и теоретических результатов для молекул, обладающих высоким электрическим дипольным моментом, сделана впервые. Автор диссертационной работы всесторонне охарактеризовал исследуемые системы и представил большой объем новых экспериментальных данных, которые дополнены результатами модельных квантово-механическими расчетами, что отражает высокую степень **научной новизны и значимости** работы. Автор продемонстрировал квалифицированное владение указанными методами исследования поверхности и грамотную обработку полученных экспериментальных результатов, включая моделирование на основе теории функционала плотности.

Проведенное в работе систематизированные исследования механизмов адсорбции, физико-химических свойств и ориентации молекул в орга-

металлическом интерфейсе несомненно составляет высокую **практическую значимость** работы при использовании полярных молекул $C_{60}F_{18}$ в элементах органической микроэлектроники.

Достоверность изложенных результатов и выводов подтверждается использованием автором современных хорошо опробованных экспериментальных и теоретических методик физики поверхности, созданием исследуемых систем и их изучением непосредственно в условиях сверхвысокого вакуума.

К тексту диссертации имеются следующие **замечания и вопросы**:

1. Почему в качестве моделей инертной и соответственно активной поверхности металла выбраны не идентичные по симметрии грани золота и никеля, Au(111) и Ni(100)? Казалось бы удобнее было сравнивать Au(111) и Ni(111) или Au(100) и Ni(100).
2. К сожалению, для поверхности Ni(100) отсутствуют данные по сканирующей туннельной микроскопии, что является недостатком в плане характеристики объекта исследования.
3. Достаточно слабо использована сканирующая туннельная спектроскопия (СТС). Можно было бы также провести сравнение СТС и ультрафиолетовой фотоэлектронной спектроскопии. Этого в работе сделано не было.

Указанные замечания не затрагивают основных выводов работы. Автореферат диссертации в полной мере соответствует ее содержанию. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в российских и международных журналах. Работа проведена на высоком научном уровне.

Считаю, что содержание работы и форма его представления соответствует требованиям пунктов 9-14 «Положения о порядке

присуждения ученых степеней» ВАК Минобрнауки России в редакции Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. за №842, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Ратибор Григорьевич Чумаков заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент

Зав. отделом технологий и измерений атомного масштаба

д.ф.-м.н.

К.Н. Ельцов

ФГБУН Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук.

119991 Москва, ул. Вавилова, д.38. Тел. +7 499 5038769.

Эл.почта: eltsov@kapella.gpi.ru

Подпись руки К.Н. Ельцова заверяю

Заместитель директора Института

к.ф.м.н.



Д.Г. Кочиев

07 ноября 2018 г.