

**РЕШЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА УрФУ 01.03.15
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК**

от «26» февраля 2021 г. № 7

о присуждении Лэй Сюе, гражданство Китайской Народной Республики, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Modeling the influence of structure modification of low-size ZnO, β -C₃N₄, InSe and single-layer boron on their physical properties» (Моделирование влияния модификации структуры низкоразмерных материалов ZnO, β -C₃N₄, InSe и однослойного бора на их физические свойства) по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния принята к защите диссертационным советом УрФУ 01.03.15 «11» января 2021 г. протокол № 1.

Соискатель, Лэй Сюе, 1991 года рождения,

в 2015 г. Лэй Сюе окончила Университет Внутренней Монголии Китайской Народной Республики по специальности «Физика»;

в 2019 г. окончила очную аспирантуру ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия (Физика конденсированного состояния);

работает в должности инженера-исследователя научно-исследовательской лаборатории «Физика функциональных материалов углеродной микро- и оптоэлектроники» ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Диссертация выполнена на кафедре физических методов и приборов контроля качества и в научно-исследовательской лаборатории «Физика функциональных материалов углеродной микро- и оптоэлектроники» Физико-технологического института ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Минобрнауки России.

Научный руководитель – кандидат технических наук, доцент, Зацепин

Анатолий Федорович, ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Физико-технологический институт, кафедра физических методов и приборов контроля качества, профессор.

Официальные оппоненты:

Галахов Вадим Ростиславович – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, ФГБУН Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург, лаборатория рентгеновской спектроскопии, главный научный сотрудник;

Кащенко Михаил Петрович – доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Уральский государственный лесотехнический университет», г. Екатеринбург, Социально-экономический институт, кафедра общей физики, заведующий кафедрой;

Кислов Алексей Николаевич, доктор физико-математических наук, доцент, ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», г. Екатеринбург, Институт фундаментального образования, кафедра строительной механики, заведующий кафедрой

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 9 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации – 9, из них 6 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, определенных ВАК и Аттестационным советом УрФУ и входящих в международные базы цитирования Scopus и Web of Science. Общий объем опубликованных работ по теме диссертации – 5,94 п.л., авторский вклад – 1,86 п.л.

Основные публикации по теме диссертации:

статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, определенных ВАК и Аттестационным советом УрФУ:

1. **Lei, X.** First-principle studies of optical properties of $\text{Be}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ ternary mixed crystal / **X. Lei**, C. H. Wong, E. A. Buntov, A. F. Zatsepin, G. J. Zhao,

D. W. Boukhvalov // *Optik - International Journal for Light and Electron Optics*. – 2019. – V. 178. – P. 691-697; 0,77 п.л. / 0,38 п.л. (Web of Science, Scopus).

2. C. H. Wong. Revisiting the entangled chains of polymer in the carbyne model / C. H. Wong, **X. Lei**, E. A. Buntov, A. F. Zatsepin // *Brazilian Journal of Physics*. – 2018. – V. 48. – P. 571-575; 0,55 п.л. / 0,14 п.л. (Web of Science, Scopus).

3. R. Murugan. Facile and large-scale aqueous synthesis of CdS nanoparticles at room temperature towards optoelectronic applications / R. Murugan, M. R. Kumar, D. S. Chander, S. C. Kishore, **X. Lei**, P. J. Sophia // *Materials Research Express*. – 2018. – V. 5. № 105003. 0,99 п.л. / 0,10 п.л., (Web of Science, Scopus).

4. **Lei, X.** Modeling of Electronic and optical properties of C_3N_4 within DFT frame / **X. Lei**, D. W. Boukhvalov, A. F. Zatsepin // *AIP Conference Proceedings*. – 2019. – V. 2174. – № 020133; 0,77 п.л. / 0,25 п.л. (Scopus).

5. **Lei, X.** First-Principles Modeling of Atomic Structure and Chemical and Optical Properties of $\beta-C_3N_4$ / **X. Lei**, D. W. Boukhvalov, A. F. Zatsepin // *Journal of Carbon Research*. – 2019. – V. 5. – P. 1-9; 0,99 п.л. / 0,33 п.л. (Web of Science).

6. **Lei, X.** Chemical instability of free-standing boron monolayers and properties of oxidized borophene sheets / **X. Lei**, D. W. Boukhvalov, A. F. Zatsepin // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. – 2020. – V. 120. – № 114082; 1,54 п.л. / 0,51 п.л. (Web of Science, Scopus).

На автореферат поступили отзывы от:

1. Никонорова Николая Валентиновича, доктора физико-математических наук, профессора, ведущего профессора факультета фотоники и оптоинформатики, директора научного центра оптического материаловедения ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский университет ИТМО», г. Санкт-Петербург. Без замечаний.

2. Щаповой Юлии Владимировны, кандидата физико-математических наук, доцента, ведущего научного сотрудника, и.о. заведующего ла-

бораторией физических и химических методов исследования минерального вещества ФГБУН Институт геологии и геохимии Уральского отделения Российской академии наук, г. Екатеринбург. Без замечаний.

Выбор официальных оппонентов обосновывается известностью их научных достижений, большим научным вкладом и авторитетом в области физики конденсированного состояния.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук соответствует п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований содержится решение научной задачи моделирования влияния модификации структуры низкоразмерных материалов ZnO, β -C₃N₄, InSe и однослойного бора на их физические свойства, имеющей значение для современной физики конденсированного состояния в области проектирования новых фотонных устройств с заданными свойствами, магнитных материалов, обладающих d0-магнетизмом, интерпретации экспериментальных данных и описания особенностей физических явлений в наноразмерном состоянии материалов ZnO, β -C₃N₄, InSe и однослойного бора.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку. Автором установлено, что:

- изменение оптических свойств трехкомпонентного смешанного кристалла Zn_{1-x}Be_xO связано с изменением параметров из-за увеличения концентрации Be;
- основной вклад в изменение оптических свойств β -C₃N₄ вносит отклонение атомной структуры от идеальной;
- формирование дефектов на поверхности β -C₃N₄ приводит к существенному изменению величины энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости;

- окисление монослоя бора при комнатной температуре приводит к формированию аморфной пленки B_xO_y независимо от начальной конфигурации;
- рассчитанные энергии адсорбции различных газов на поверхности однослойного селенида индия существенно зависят от оптимизации атомных позиций или параметров решетки;
- появление магнитного момента, обусловленного наличием разорванных связей, происходит при окислении борофена, а также возникновении дефектов на поверхности β - C_3N_4 .

Автором работы впервые установлена зависимость электронной структуры и оптических свойств смешанного кристалла $Be_xZn_{1-x}O$ от концентрации бериллия; проведено моделирование атомной структуры нанокластеров β - C_3N_4 , атомной структуры поверхности и поверхностных дефектов; выявлены особенности взаимодействия двумерных мембран бора с окружающей средой; обнаружены химически стабильные магнитные центры в низкоразмерных структурах, которые не содержат переходные металлы; выявлена роль различных способов модификации атомной структуры в формировании адсорбционных характеристик молекул на поверхности; разработаны подходы к моделированию химической устойчивости различных двумерных систем; дана оценка влияния пространственных искажений мембраны $InSe$ на ее электронную структуру, оптические и химические свойства.

Результаты диссертации расширяют фундаментальные представления о связи между атомной структурой и оптическими свойствами чистых и химически-модифицированных низкоразмерных систем.

На заседании 26 февраля 2021 г. диссертационный совет УрФУ 01.03.15 принял решение присудить Лэй Сюе ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении открытого голосования диссертационный совет УрФУ 01.03.15 в количестве 21 человека, из них в удаленном интерактивном режиме

– 13, в том числе 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 21, против – нет, воздержались – нет.

Председатель

диссертационного совета

УрФУ 01.03.15

Огородников Игорь Николаевич

Ученый секретарь

диссертационного совета

УрФУ 01.03.15

Ищенко Алексей Владимирович

26 февраля 2021 г.