

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу  
Прищенко Данила Александровича  
«**Особенности элементарных возбуждений в одноэлементных  
двумерных материалах на основе пниктидов**»,  
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук  
по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Прищенко Данила Александровича посвящена расчету электронной структуры, оптических и колебательных характеристик черного фосфора и сурьмы – представителей семейства одноэлементных двумерных материалов на основе пниктидов. Исследование двумерных материалов относится к одному из наиболее новых и быстроразвивающихся направлений физики конденсированного состояния и современного материаловедения. Эти материалы зачастую демонстрируют неординарные электронные и динамические свойства по сравнению с трехмерными аналогами, что обуславливает интерес исследователей. Однако, несмотря на уникальные физические свойства, демонстрирующие перспективность этих систем для электроники и оптоэлектроники, только ограниченное число двумерных материалов исследовано детально. Недавние исследования показали, что новые двумерные материалы на основе черного фосфора являются полупроводниками и имеют высокую электропроводность и теплопроводность, что делает их перспективными для применения в оптоэлектронных устройствах. Стабильность двумерных материалов существенно зависит от числа слоев, наличия дополнительных примесей на поверхности, температуры и приложенного поля. Однако, микроскопический механизм влияния этих факторов не был установлен для двумерных черного фосфора и сурьмы с примесями фтора и водорода. Эта задача, а именно, установление структурной устойчивости, электронной структуры, оптических свойств этих систем решалась в диссертационной работе.

**Актуальность** исследования обусловлена тем, что поиск новых материалов с уникальными свойствами является одной из важных задач физики конденсированного состояния и материаловедения.

**Достоверность результатов работы** гарантируется физической ясностью обоснования задач и адекватностью используемых подходов и методов, внутренней непротиворечивостью и доказательностью обсуждения результатов, воспроизводимостью полученных данных и их согласием с известными из литературных источников экспериментальными данными и представлениями.

**Научная значимость** кандидатской диссертационной работы Д.А. Прищенко в области физики конденсированного состояния, прежде всего,

связана с развитием и углублением фундаментальных знаний о свойствах двумерных материалов.

**Практическая значимость** исследований, выполненных в диссертационной работе, обусловлена тем, что полученные результаты объясняют микроскопический механизм поведения рассматриваемых материалов при различных внутренних и внешних условиях, что необходимо, для проектирования новых устройств электроники.

### **Новизна научных результатов и выводов диссертации**

Основными важными и новыми научными результатами и выводами данной работы, которые вносят существенный вклад в развитие фундаментальных и прикладных представлений об электронных и динамических свойствах двумерных материалов, являются следующие:

1. Установлено, что двумерный черный фосфор при полном покрытии атомами фтора становится структурно устойчивым, а покрытие водородом приводит к неустойчивой структуре. Также показано, что при одностороннем покрытии примесными атомами черный фосфор становится металлом с конечной плотностью состояний на уровне Ферми. Впервые продемонстрировано, что в присутствии примесей материал разлагается на связанные цепочки, состоящие из атомов фосфора и атомов примеси.

2. Впервые рассчитан спектр плазмонных возбуждений двумерного черного фосфора и произведена классификация различных типов возбуждений. Были получены значения экранированных кулоновских взаимодействий для разного количества слоев и проверена их зависимость от уровня электронного допирования. Также проанализирована анизотропия рассчитанной диэлектрической функции черного фосфора и полученных экранированных кулоновских взаимодействий.

3. Для двумерной сурьмы впервые продемонстрирована зависимость рассчитанного плазмонного спектра от приложенного внешнего электрического поля. Показано, что энергия оптических плазмонных возбуждений меняется в пределах среднего инфракрасного диапазона.

4. Впервые установлена зависимость фононных характеристик и параметра решетки от температуры для двумерного черного фосфора и двумерной сурьмы. Показано, что с увеличением температуры параметры решетки двумерного черного фосфора увеличиваются, а двумерной сурьмы уменьшается.

### **Структура, оформление диссертации, публикации**

Диссертация хорошо структурирована, состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы. Общий объем работы 113 страниц, включая 43 рисунка, 8 таблиц, 111 наименований цитированной

литературы. Основное содержание работ представлено в 4 научных статьях в ведущих рецензируемых журналах по перечню ВАК и ряде международных конференций. Автореферат и опубликованные статьи отражают основное содержание диссертации.

Во **введении** приводится обзор научной литературы по изучаемой проблеме, обосновывается актуальность исследований, формулируется цель и задачи работы, излагается научная новизна, теоретическая и практическая значимость диссертации.

В **первой главе** автор приводит обзор методов, используемых в диссертационном исследовании. Внимание уделено как первопринципным, так и модельным методам расчета электронной структуры. В конце главы приводится описание процедуры молекулярно-динамического моделирования.

Во **второй главе** описано исследование электронной структуры и динамики решетки черного фосфора в присутствии примесей фтора и водорода. На основе рассчитанных колебательных спектров сделан вывод о структурной устойчивости черного фосфора в рассматриваемых условиях.

В **третьей главе** приведены результаты расчета оптоэлектронных характеристик черного фосфора и сурьмы при различных условиях. Для черного фосфора рассчитаны диэлектрическая функция, экранированные кулоновские взаимодействия и плазмонный спектр для разного количества слоев. Для сурьмы проведен анализ зависимости расчетного плазмонного спектра от силы приложенного внешнего электрического поля.

В **четвертой главе** приводится описание процедуры молекулярно-динамического моделирования изучаемых соединений при различных температурных режимах, на основе которого затем были рассчитаны соответствующие фононные спектры.

В **заключении** сформулированы основные результаты работы и перспективы дальнейшей разработки темы исследования.

Текст диссертации написан последовательно, ёмко и ясно, с грамотным использованием терминологии.

По содержанию диссертации имеются некоторые замечания:

1. Во второй главе для рассмотрения влияния примесей на свойства черного фосфора были выбраны одновалентные примесные атомы фтора и водорода. Возможно, для полноты исследования, автору стоило бы дополнительно рассмотреть влияние других наиболее часто встречающихся в атмосфере примесных типов атомов, например атомов кислорода и азота.

Особенно важным является изучение механизма влияния фтора и водорода на процесс окисления, который существенно ухудшает свойства фосфорена.

2. Были ли проведены расчеты характеристик сурьмы для различного количества слоев, аналогично случаю для черного фосфора?

3. Чем обусловлен выбор типа классического потенциала для молекулярно-динамического моделирования черного фосфора и сурьмы?

4. Стр.45. Как наличие большой щели связано с его стабильностью?

5. Стр.55. Как задавался параметр отсечки в уравнениях 3.4-3.6?

6. Стр. 90. Утверждается, что результаты хорошо согласуются с первопринципными расчетами, но эти данные не приведены.

7. Для черно-белого варианта диссертационной работы было бы лучше использовать различные типы точек и линий на графиках (рис.3.2, 3.8, 3.9, 4.3,4.4).

Отмеченные вопросы и замечания не носят принципиального характера и не снижают значения ценности и высокой положительной оценки диссертационной работы, квалификации, роли и вклада ее автора.

### **Заключение**

Диссертация Прищенко Д.А. выполнена на высоком современном научном уровне, является законченным и самостоятельным исследованием, в котором с использованием теоретических методов решена важная и актуальная научная задача установления основных закономерностей и механизмов влияния примесей фтора и водорода при различных условиях на стабильность, электронную структуру, оптические, фононные и плазмонные спектры.

Диссертация Прищенко Д.А. представляет собой завершённую научно-исследовательскую работу на актуальную тему, содержит новые оригинальные результаты, имеющие высокую теоретическую и практическую значимость. Исследования, выполненные автором диссертации, вносят существенный вклад в решение важной научной задачи физики конденсированного состояния по разработке наиболее перспективных для практического применения соединений.

Результаты диссертации с достаточной полнотой опубликованы в 4 печатных работах в высокорейтинговых рецензируемых научных журналах, определенных ВАК и Аттестационным советом УрФУ.

Тема и содержание работы соответствуют паспорту специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния. Автореферат и опубликованные работы правильно и полно отражают содержание

диссертации. Достоверность и новизна полученных результатов хорошо обоснованы, личный вклад автора ясно определен.

Считаю, что диссертационная работа соответствует требованиям п.п. 9-11 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, Прищенко Данил Александрович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент,  
доктор физико-математических наук,  
старший научный сотрудник, главный научный сотрудник  
лаборатории квантовой химии и спектроскопии  
имени профессора А.Л. Ивановского  
Федерального государственного бюджетного  
учреждения науки «Институт химии твердого тела  
Уральского отделения Российской академии наук»

Медведева Надежда Ивановна

« 18 » января 2021 г.

Адрес организации: 620990, Екатеринбург, ГСП, ул.  
Первомайская, 91, Федеральное государственное  
бюджетное учреждение науки Институт химии твердого  
тела УрО РАН, [www.ihim.uran.ru](http://www.ihim.uran.ru),  
E-mail: [medvedeva@ihim.uran.ru](mailto:medvedeva@ihim.uran.ru), тел. +7 (343) 362-3554.

Подпись Медведевой Н.И. заверяю  
Ученый секретарь ФГБУН  
Институт химии твердого тела УрО РАН,

Кандидат химических наук Е.А. Богданова



Дата: 18.01.2021 г.