

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»

Начиная с открытия графена в 2004 году и демонстрации его уникальных механических и электронных свойств, интерес к двумерным соединениям продолжает возрастать. Последующее применение графена и других (квази)двумерных материалов в качестве элементной базы в нанoeлектронике делает данную тематику исследований чрезвычайно интересной не только с чисто теоретической точки зрения, но и очень востребованной в прикладных областях физики. Таким образом, изучение свойств двумерных материалов является одним из наиболее актуальных направлений в современной физике конденсированного состояния. Помимо электронных характеристик для практических применений в качестве основы новых устройств электроники необходимо также уделить внимание структурной стабильности исследуемых соединений. В данной диссертационной работе были проведены исследования структурной стабильности фосфорена в присутствии водорода и фтора, зависимости колебательных свойств монослоя черного фосфора и сурьмы от температуры окружающей среды, плазмонных возбуждений в черном фосфоре и сурьме. Подытоживая вышесказанное, тема диссертации Прищенко Данила Александровича «Особенности элементарных возбуждений в одноэлементных двумерных материалах на основе пниктидов» несомненно является актуальной.

Автором впервые продемонстрировано влияние одновалентных примесей фтора и водорода на структурную стабильность монослоя черного фосфора путем расчета соответствующих фононных спектров. Также с использованием GW приближения рассчитана диэлектрическая функция, получены значения экранированных кулоновских взаимодействий и вычислен плазмонный спектр в черном фосфоре для разного количества слоев. Впервые была продемонстрирована зависимость плазмонных возбуждений в двумерной сурьме от величины внешнего электрического поля.

Полученные в работе результаты позволяют предсказать, как исследуемые материалы и их свойства будут вести себя в реальных условиях, что важно для практических применений. Помимо этого приведенные результаты демонстрируют возможности по контролю заданных оптоэлектронных характеристик рассматриваемых в данной работе соединений.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 111 наименований. Работа изложена на 113 страницах. Диссертация написана последовательно и логично, текст написан в научном стиле и соответствует требованиям, предъявляемым к научно-квалификационным работам.

Во введении обосновывается актуальность работы, даётся краткий обзор современного состояния науки в области исследования двумерных систем. Сформулированы цель и задачи работы, определены её научная новизна, практическая ценность, а также подробно изложен личный вклад автора.

В первой главе рассмотрен обзор методов, используемых в данной диссертации. Описаны первопринципные и модельные методы расчета электронной структуры, метод замороженных фононов и основные положения методов классической молекулярной динамики.

Вторая глава посвящена исследованию влияния одновалентных атомов фтора и водорода на структурную стабильность фосфорена. Приведены рассчитанные электронные структуры и фононные спектры для каждого вида покрытия примесными атомами. Показана нестабильность данного материала в присутствии моновалентных газов и предсказано направление деградации материала с распадом на цепочки. Показано, что водород приводит к более сильной деградации фосфорена по сравнению с фтором.

Третья глава посвящена изучению оптоэлектронных свойств черного фосфора и сурьмы в зависимости от количества слоев в материале (от одного до трех). Для черного фосфора в приближении случайных фаз рассчитаны диэлектрическая функция, экранированные кулоновские взаимодействия на узле и между различными атомами фосфора и плазмонные спектры в зависимости от количества слоев. Для двумерной сурьмы рассчитаны плазмонные спектры в отсутствие внешнего воздействия и при воздействии внешнего электрического поля, направленного перпендикулярно поверхности. Также показана важность учета нелокальных пространственных эффектов.

В четвертой главе исследованы вибронные свойства фосфорена и антимонена в зависимости от температуры. Показано, что ангармонизм в двумерном черном фосфоре и двумерной сурьме приводит к уменьшению частот фононных колебаний по всей зоне Бриллюэна. При этом оптическая составляющая спектра претерпевает большие изменения по сравнению с акустической частью для обоих соединений. Также было показано, что коэффициент теплового расширения положителен для фосфорена и отрицателен для антимонена, что может быть вызвано разницей в их внеплоскостной жесткости.

В заключении сформулированы основные выводы по работе.

Вместе с тем при прочтении диссертации возник ряд вопросов и замечаний:

1. Во второй главе для релаксации атомов была выбрана исходная элементарная ячейка. В таком случае нет уверенности в том, что полученная релаксированная структура является правильной, ведь не учтена возможность искажений с характеристической длиной, большей размера ячейки. Почему не была рассмотрена ячейка большего размера?

2. Экранированное одноузельное кулоновское взаимодействие в монослое черного фосфора (равняется примерно 5-7 эВ, см. рис. 3.8 и 3.9) сравнимо с шириной зоны проводимости (рис. 2.3), что говорит о умеренных корреляционных эффектах в данном соединении и обосновывает применение GW приближения. Однако все расчеты фононных спектров выполнены либо в рамках теории функционала электронной плотности, либо в рамках классической молекулярной динамики с потенциалами Стилингера-Вебера, в которых эффекты электрон-электронного взаимодействия учтены недостаточным образом. Между тем, учет корреляционных эффектов может привести к существенной перестройке фононного спектра. Почему не проводились расчеты вибронных свойств в рамках GW метода?

3. С чем связано изменение характера щели в однослойном черном фосфоре при его полном покрытии моновалентными атомами?

4. Во второй главе приведены результаты расчетов структурных параметров и зонной структуры для «двух различных структур, полученных путем наложения определенных ограничений симметрии, для случая полного покрытия примесными атомами фтора и водорода». При этом нет данных о том, какие именно симметричные ограничения использовались, и чем они вызваны. Хотелось бы получить комментарий диссертанта по данному вопросу.

5. Почему не используются названия фосфорен и антимонен для обозначения монослоев черного фосфора и сурьмы, соответственно? Это было бы совершенно естественно и уместно в данной диссертационной работе.

6. Не во всех уравнениях полностью определены вводимые обозначения. Например, что такое $E_{Ne}[\rho]$ в уравнении (1.22)?

Тем не менее, высказанные замечания не изменяют общего положительного впечатления от данной работы. Представленная диссертация является завершённым научным исследованием. Полученные в работе результаты были опубликованы в ведущих международных физических журналах и доложены на российских и международных конференциях. Выводы диссертации обоснованы и подтверждены сравнением с опубликованными теоретическими и экспериментальными данными. Работа выполнена на высоком мировом уровне и посвящена актуальным проблемам современной физики двумерных систем, удовлетворяет всем критериям новизны, достоверности и практической значимости.

Автореферат полностью отражает основное содержание диссертации.

В целом полагаю, что диссертационная работа «Особенности элементарных возбуждений в одноэлементных двумерных материалах на основе пниктидов» полностью соответствует паспорту специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния» и требованиям пп. 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,
кандидат физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник лаборатории оптики металлов
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Института физики
металлов имени М.Н. Михеева Уральского
отделения Российской академии наук

Потеряев Александр Иванович

«18» января 2021 г.

Почтовый адрес:
620137, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, д. 18,
ИФМ УрО РАН
тел.: +7 (343) 378 38 14
факс: +7 (343) 374 5244
эл. почта: poteryaev@imp.uran.ru

