

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Лэй Сюе

“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»), представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния

Актуальность избранной темы.

Диссертационная работа Лэй Сюе посвящена исследованию низкоразмерных материалов, представляющих интерес для многих разделов физики и химии, а также для энергетики, катализа, медицины и пр. В работе рассмотрены 4 системы, изучение каждой из которых из которых могли бы составить предмет диссертационного исследования. Но особенно хотелось бы отметить новую систему — борофен. Этот материал, вслед за графеном, в настоящее время является объектом интенсивного изучения. В свете всего этого можно утверждать, что работа весьма и весьма актуальна.

Целью диссертационной работы Лэй Сюе является комплексное исследование атомной структуры новых материалов для оптики, электроники и фотоэлектроники на основе оксидных и низкоразмерных систем и установление систематической взаимосвязи между морфологией материала, его химической стабильностью и модификацией поверхности различными способами (легирование, создание дефектов, окисление поверхности и т. п.). Основное внимание в работе уделено изучению фотоактивности наноматериалов в зависимости от вклада химически модифицированной поверхности.

Выбор объектов исследования весьма интересен и хорошо обоснован: ZnO — относительно крупные наночастицы, сравнительно малый вклад поверхности в формирование физических свойств; нитрид углерода — наночастицы малого размера с существенным влиянием поверхности на физические свойства; селенид индия — так называемая ван-дер-ваальсовая система, которые могут образовывать однослойную мембрану; однослойный бор (борофен) — проводник, аналог графена. Такой выбор объектов исследования позволяет систематически изучать взаимосвязь между физическими и химическими свойствами наноматериалов.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и библиографического списка использованной литературы из 239 наименований. В соответствии с авторефератом, диссертация изложена на 143 страницах, включает 55 рисунков и 7 таблиц. В реальности объем диссертации составляет 138 страниц

(в выставленном на сайте университета варианте, согласно нумерации, без учета титульного листа). Результаты, полученные диссертантом, изложены в главах 2 – 6.

Во *введении* обоснована актуальность тематики диссертационной работы, определены цель и задачи исследования, отмечена новизна поставленных задач и полученных результатов, сформулированы научные положения, выносимые на защиту, приведена информация о научной апробации диссертации.

В *первой главе*, которая является литературным обзором, описано состояние проблемы: влияние модификации низкоразмерных систем на их электронную структуру и оптические свойства. Анализ литературы позволил соискателю обосновать и конкретизировать выбор объектов исследования, поставить задачи собственных исследований и определить методы их решения.

Во *второй главе* на основе приведено описание теоретических основ исследования низкоразмерных материалов с учетом поверхностных эффектов. Рассмотрена теория функционала плотности, являющейся основой используемых диссертантом методов расчета электронной структуры и моделирования поверхности наноматериалов.

Третья глава, являющаяся оригинальной, посвящена изучению влияния дефектов на электронную структуру и оптические свойства материалов на примере примесей бериллия в оксиде цинка. Рассмотрено изменение атомной структуры и физических свойств оксида цинка после легирования бериллием.

В *четвертой главе* представлены результаты теоретического моделирования электронных и оптических свойств идеального и неупорядоченного бета-карбонитрида (β -C₃N₄) с учетом дефектности и поверхностных эффектов.

В *пятой главе* рассмотрена химическая устойчивость в условиях окружающей среды и физические свойства окисленных борофеновых листов.

В *шестой главе* рассмотрены адсорбционные свойства и химическая стабильность селенида индия (InSe).

В *заключении* обобщены результаты диссертационной работы.

Список использованной литературы (239 наименований) охватывает основной круг отечественных и зарубежных публикаций по теме диссертационного исследования.

Новизна полученных результатов корректно отображена в соответствующих разделах диссертации и автореферата. Несомненно, что все полученные соискателем научные результаты являются новыми и имеют важное значение (в зависимости от объекта) для создания фотокатализаторов, электродов топливных элементов, светолучающих систем, химических датчиков, солнечной энергетики, сенсорики, спинтоники и пр.

Достоверность полученных данных обеспечена применением современных сертифицированных компьютерных программ для молекулярно-динамического и квантово-химического моделирования. Полученные в ходе работы результаты соответствуют известным литературным данным.

Обоснованность научных положений и выводов обеспечивается корректностью постановки цели работы, решаемых задач, хорошим уровнем теоретических исследований с помощью современных, хорошо апробированных, методов.

По работе имеются следующие замечания.

1. Не совсем ясен термин “комплексное исследование”, используемый в постановке задачи. Обычно под комплексным исследованием понимают совокупность различных методов (как правило, различных экспериментов, дополненных теоретическими расчетами). В данной работе исследование проведено одним методом: первопринципными расчетами на основе теории функционала плотности (DFT).
2. Диссертант использует расчеты плотности электронных состояний для воспроизведения оптических свойств заявленных материалов. Однако в диссертации отсутствуют экспериментальные оптические спектры, которые могли бы подтвердить правильность расчетов.
3. В диссертации имеется много иллюстраций, взятых из литературы. Однако ссылки на источники заимствования даны лишь в тексте, в подписях к рисункам их нет.
4. В 6-м положении, выносимом на защиту (автореферат), говорится о появлении магнитных моментов в борофене из-за окисления в β - C_3N_4 вследствие дефектов на поверхности. В выводах вообще не упоминается о магнетизме в β - C_3N_4 . Фактически положение 6 не защищено. Если магнетизм в борофене достаточно подробно рассмотрен в главе 5 и подкреплен расчетами, то о магнетизме в β - C_3N_4 можно лишь предполагать. В главе 4 сообщается, что расчеты демонстрируют появление магнитных моментов на гидрированной и фторированной поверхности β - C_3N_4 . Из каких результатов следует это положение? Я могу предположить, что автор опирается на расчеты, показанные на рис. 4.4.3. Однако увидеть явное проявление магнетизма из этой картинки весьма затруднительно. На мой взгляд, необходим более подробный анализ расчетов, чтобы подтвердить этот весьма нетривиальный результат.
5. Имеется расхождение между числом положений, выносимых на защиту (их 6), и выводами (их 5). В разделе “Новизна” вообще 7 пунктов. Если пункт 1 положе-

ний, выносимых на защиту, соответствует пункту 1 выводов, то дальше начинается расхождение.

6. Имеется расхождение между диссертацией и авторефератом в разделе “Заключение” (“Conclusion”). В автореферате выводы хорошо структурированы (их 5), а в диссертации фактически дается общий взгляд на полученные результаты, без детализации.

Приведенные выше замечания не влияют на общую положительную характеристику работы и носят рекомендательный характер. В целом, работа выполнена на очень высоком профессиональном уровне, который значительно превосходит требования, предъявляемые к кандидатским диссертациям. Результаты диссертации апробированы: доложены на международных и российских конференциях. Материалы диссертации представлены публикациями, входящими в перечень ВАК РФ и в базу данных Web of Science.

Общий вывод по диссертационной работе. Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу и может быть классифицирована как решение задачи, имеющей существенное значение для физики конденсированного состояния: *исследование атомной структуры новых материалов для оптики, электроники и фотозлектроники на основе оксидных и низкоразмерных систем и установление систематической взаимосвязи между морфологией материала, его химической стабильностью и модификацией поверхности различными способами*

Рецензируемая работа представляет собой завершённое исследование. Она прошла апробацию на многочисленных международных конференциях. Публикации достаточно полно отражают содержание диссертации. Результаты являются новыми и могут быть использованы в научных и научно-производственных учреждениях и организациях, которые занимаются исследованиями и применениями наноразмерных систем.

Содержание диссертации соответствует формуле Паспорта специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния — и следующим пунктам паспорта: «1. Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и в том числе материалов световодов как в твердом, так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления.»

«5. Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения.»

Высокий научный уровень и большой объем выполненных исследований, значимость и достоверность результатов, а также практической ценности — все это позволяет сделать вывод, что диссертация Лэй Сюе соответствует всем требованиям, п. 9-11 «Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ», предъявляемым диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, Лэй Сюе, заслуживает 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 рентгеновской спектроскопии

Федерального государственного

бюджетного учреждения науки

Института физики металлов

им. М. Н. Михеева УрО РАН

01.04.07 — физика конденсированного состояния

тел.: (343) 378-37-37

e-mail: galakhov@ifmlrs.uran.ru

Галахов Вадим Ростиславович

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт физики металлов им. М. Н. Михеева

Уральского отделения Российской академии наук

620137 Екатеринбург, ул. С. Ковалевской, 18

тел.: (343) 374-02-30; факс: (343) 374-52-44

e-mail: physics@imp.uran.ru



Подпись *Галахов В.Р.*
заверяю
Ученый секретарь ИФМ УрО РАН
И.Ю. Аралова
«01» февраля 2021 г.