

ОТЗЫВ

Официального оппонента
на диссертационную работу Лэй Сюе
“Modeling the influence of structure modification of lowsize 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»),
представленную на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук
по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Актуальность темы

Любые материаловедческие задачи всегда нацелены на создание материалов с требуемыми (для различных целевых функций) свойствами. Варьирование химического состава и модификация структуры – два универсальных способа решения проблем материаловедения. Комбинирование этих способов приводит к практически неограниченному множеству вариантов, сознательный отбор из которого определенного, характерного для исследования, подмножества уже является важным стартовым этапом, в значительной мере ограничивая тематику работы.

В данной работе в качестве объектов исследования выбраны низкоразмерные материалы с различающимися морфотипами: наночастицы (от относительно крупных для оксида цинка до сравнительно мелких в случае нитрида углерода), слоистые структуры со слабыми нековалентными связями между слоями (селенид индия) и двумерный кристалл бора (борафен).

Для низкоразмерных материалов является обязательным анализ влияния поверхности на их свойства. При этом многие свойства сильно зависят от особенностей атомной структуры поверхности, степени ее совершенства и химической стабильности.

В конечном итоге понимание наблюдаемых свойств, как и прогнозирование желаемого набора свойств, замыкается на необходимость

исследования особенностей электронной и ионной (атомной) структуры материалов.

В данной работе основное внимание уделяется влиянию поверхности на фотоактивность материалов, представляющих большой интерес для оптики, электроники и фотоэлектроники.

Решение комплекса проблем в диссертации опирается на компьютерное моделирование наноматериалов. Для первопринципного моделирования электронной структуры указанных выше систем используются расчеты в рамках теории функционала плотности, хорошо апробированной при решении задач физики твердого тела.

Надежность методологии позволяет выполнить анализ свойств низкоразмерных материалов в зависимости от модифицирования поверхности за счет различных факторов (допированное изменение состава, изменение параметра решетки, адсорбция атомов и молекул...). Это обуславливает актуальность и прогностическую ценность работы.

Структура и основное содержание работы

Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения и списка цитированной литературы. Общий объем диссертационной работы составляет 143 страницы, в том числе 55 рисунков, 7 таблиц и списка литературы, включающего 239 источников.

Первая глава содержит литературный обзор и его анализ, приводящий к постановке задач исследования. Вторая глава посвящена изложению методики исследования (теория функционала плотности с учетом поверхностных эффектов). Последующие четыре оригинальные главы освещают влияние на электронную структуру исследуемых низкоразмерных материалов ряда физически значимых факторов: дефектов (на примере примесей бериллия в оксиде цинка), различных вариантов беспорядка (на примере бета-карбонитрида), окисления поверхности (на примере борофена),

адсорбции газов (на примере селенида индия). В Заключении четко изложены основные выводы исследования.

Анализ защищаемых положений. В работе представлены шесть защищаемых положений.

Первое защищаемое положение связывает изменение оптических свойств допированной бериллием окиси цинка с изменением параметра решетки при введении бериллия.

Второе защищаемое положение связывает изменение оптических свойств бета-карбонитрида с отклонением от идеального атомного упорядочения.

Третье защищаемое положение интерпретирует существенное изменение величины энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости как следствие формирования дефектов на поверхности бета-карбонитрида.

Четвертое защищаемое положение рассматривает окисление борофена как естественную причину трансформации его электронной структуры из металлической в полупроводниковую.

Пятое защищаемое положение акцентирует внимание на существенной зависимости энергий адсорбции газов на однослойной поверхности селенида индия в зависимости от того, является ли она свободной (мембраной) или расположена на подложке.

Шестое защищаемое положение связывает появление химически стабильного d0-магнетизма с сохранением неспариванных разорванных связей в окисленном борофене и наличием дефектов поверхности в карбонитриде.

Новизна полученных результатов

По существу, все выносимые на защиту положения являются новыми в научном отношении.

Для рецензента, занимавшегося влиянием магнитной подсистемы на фононные спектры и реализацию мартенситных превращений в системах, содержащих атомы 3d-элементов, наибольший интерес представляет вывод об условиях реализации стабильного d0-магнетизма. Несомненно, интересны и остальные результаты.

Кроме того, оппонент отмечает большой объем выполненных расчетов, впечатляющий по глубине и широте анализ физических выводов, а также высокое качество литературного обзора.

Обоснованность и достоверность результатов работы не вызывает сомнений. Она обеспечивается использованием надежно апробированных программных пакетов для расчета электронной структуры, ясно очерченной и критически осмысленной постановкой цели исследования, внутренней непротиворечивостью работы, согласием с известными литературными данными и, что существенно, физической прозрачностью интерпретации результатов.

Основные результаты диссертационной работы достаточно полно представлены в научной печати в виде 9 научных публикаций, включая 6 статей в журналах, индексируемых в международных базах данных WoS, Scopus и входящих в перечень ВАК. Оппонент подтверждает точность приведенных в диссертации ссылок на работы автора.

Работа прошла достаточную апробацию на семи международных конференциях, конгрессах, симпозиумах.

Автореферат адекватно отражает содержание диссертации.

Практическая ценность работы

По мнению рецензента, **практическая значимость** состоит в прогностической ценности полученных результатов для последующих разработок низкоразмерных материалов для электроники, спинтроники и солнечной энергетики.

Замечания по работе

Диссертация, на мой взгляд, свободна от каких-либо существенных недоработок, тем не менее, полезно прояснить два вопроса:

1. В методической части работы отсутствует оценка погрешностей метода и возможного влияния погрешностей на результаты, полученные в работе.
2. Из модели Изинга известно, что двумерный ферромагнетизм не является устойчивым, по причине разупорядочения из-за термических флуктуаций. Рассмотрение устойчивости магнитных конфигураций осталось за рамками работы.

Разумеется, поставленные вопросы ни в коей мере не ставят под сомнение высокую оценку диссертационной работы. Работа написана хорошим языком (текст диссертации изложен на английском, а автореферат на русском языке), логика изложения материала соответствует поставленным целям.

Содержание диссертации полностью соответствует формуле специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, и п.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» паспорта специальности 01.04.07, а также критериям, которым должна отвечать диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, установленным п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней УрФУ». На использованные в диссертации результаты других авторов, в том числе, полученные при проведении совместных исследований, диссертантом, в работе даны соответствующие ссылки.

Личный вклад автора в диссертационную работу у оппонента не вызывает сомнений.

Автореферат соответствует содержанию диссертации.

Диссертация Лэй Сюе «Моделирование влияния модификации структуры низкоразмерных материалов ZnO, β -C₃N₄, InSe и однослойного бора на их физические свойства» является законченной научно-квалификационной работой, содержащей новые результаты, хорошо известные научной общественности.

Считаю, что автор диссертации Лэй Сюе, несомненно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Даю согласие на обработку персональных данных.

Официальный оппонент, заведующий кафедрой общей физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уральский государственный лесотехнический университет», доктор физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, профессор, адрес: 620100, Екатеринбург, ул. Сибирский тракт, 37, Тел.: 8 (343)-254-65-06, E-mail: general@usfeu.ru.

10 февраля 2021 г.

Подпись

Ведущий документ

«12»

М.В.
завещаю
М.В. Кошечкин
(ФИО)
20 21 г.



Кащенко Михаил Петрович