

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

В последние годы наблюдается мощный всплеск активности в исследованиях различных низкоразмерных материалов, поскольку они начинают широко использоваться во многих областях, включая энергетику, электронику и медицину. Уникальные физико-химические свойства низкоразмерных структур делают эти системы весьма перспективными. Влияние поверхности низкоразмерных объектов на указанные свойства является одной из важных их особенностей. Несмотря на то, что общие представления о таком влиянии уже довольно давно установлены, отсутствуют систематические знания о взаимосвязи электронной структуры, оптических и магнитных свойств низкоразмерных материалов с особенностями атомной структуры поверхности и ее химической стабильности. В диссертационной работе Лэй Сюе обсуждаются именно эти вопросы, которые определяют актуальность темы исследования.

Для изучения были выбраны яркие представители различных классов низкоразмерных структур: большие нанокластеры оксида цинка (ZnO), наночастицы малого размера нитрида углерода в β -фазе (β -C₃N₄), система двумерных слоев селенида индия (InSe) и двумерный монослой бора (B) – борофен.

Структура и основное содержание работы

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

В первой главе представлен литературный обзор, анализируются данные о влиянии модификации низкоразмерных систем на их электронную структуру и оптические свойства, а также приводятся сведения о возможностях применения исследуемых материалов в электронике, фотонике, оптоэлектронике и других областях науки и техники. Сформулированы задачи исследования.

Вторая глава посвящена описанию методов численного моделирования электронной структуры и оптических свойств низкоразмерных материалов с учетом поверхностных эффектов.

Остальные четыре главы являются оригинальными. В третьей главе рассмотрено влияние бериллия на атомную структуру, электронные и оптические свойства кристалла оксида цинка.

В четвертой главе приведены результаты моделирования электронных и оптических свойств идеальной и неупорядоченной β -фазы нитрида углерода с учетом дефектности и поверхностных эффектов.

Пятая глава освещает вопросы, связанные с химической устойчивостью в условиях окружающей среды, структурными и магнитными свойствами окисленных борофеновых слоев.

В последней шестой главе рассмотрены адсорбционные свойства и химическая стабильность селенида индия.

В Заключении изложены основные выводы исследования.

Анализ защищаемых положений

В диссертации представлены шесть защищаемых положений, которые являются новыми в научном отношении.

Первое защищаемое положение утверждает, что изменение оптических свойств трехкомпонентного смешанного кристалла $\text{Be}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ связано с изменением параметров решетки из-за увеличения концентрации Be.

Во втором защищаемом положении отмечено, что основной вклад в изменение оптических свойств $\beta\text{-C}_3\text{N}_4$ вносит отклонение атомной структуры от идеальной.

Третье защищаемое положение формулирует вывод о том, что формирование дефектов на поверхности β - C_3N_4 приводит к существенному изменению величины энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости.

Четвертое защищаемое положение утверждает, что окисление двумерного монослоя бора при комнатной температуре приводит к формированию аморфной пленки B_xO_y независимо от начальной конфигурации.

Пятое защищаемое положение отражает результаты того, что рассчитанные энергии адсорбции различных газов на поверхности однослойного селенида индия сильно зависят от оптимизации атомных позиций или параметров решетки.

Шестое защищаемое положение состоит в том, что появление магнитного момента, обусловленного наличием разорванных связей, происходит при окислении борофена, а также возникновении дефектов на поверхности β - C_3N_4 .

Новизна полученных результатов

Новизна представленных результатов определяется тем, что впервые:

1. установлена зависимость электронной структуры и оптических свойств смешанного кристалла $Be_xZn_{1-x}O$ от концентрации бериллия;
2. проведено моделирование атомной структуры нанокластеров β - C_3N_4 , атомной структуры поверхности и поверхностных дефектов;
3. выявлены особенности взаимодействия двумерных мембран бора с окружающей средой;
4. предсказаны химически стабильные магнитные центры в низкоразмерных структурах, которые не содержат переходные элементы;
5. выявлена роль различных способов модификации атомной структуры в формировании адсорбционных характеристик молекул на поверхности;
6. разработаны подходы к моделированию химической устойчивости различных двумерных систем;

7. дана оценка влияния пространственных искажений мембраны InSe на ее электронную структуру, оптические и химические свойства.

Обоснованность и достоверность результатов

Достоверность полученных в работе результатов не вызывает сомнений. Она обеспечивается использованием современных компьютерных программ для молекулярно-динамического и квантово-химического моделирования, внутренней непротиворечивостью работы, воспроизводимостью результатов и их согласием с известными литературными данными.

Основные результаты диссертационной работы достаточно полно представлены в научной печати в виде 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, ее результаты доложены на 7 международных и всероссийских научных конференциях, конгрессах, симпозиумах (опубликованы 3 тезиса, представленных автором с соавторами докладов).

Автореферат адекватно отражает основное содержание диссертации и соответствует научным положениям работы.

Практическая ценность работы

Работа обладает выраженной **практической значимостью**, в частности, в ней представлена разработка подхода для оценки химической стабильности двумерных систем, на который можно опираться при дальнейших теоретических исследованиях низкоразмерных систем.

Замечания по работе

В диссертации отсутствуют существенные недоработки, тем не менее, имеются следующие вопросы и замечания:

1. Достаточно ли при моделировании электронной структуры и оптических свойств исследуемых низкоразмерных структур учитывать в рамках теории функционала электронной плотности только локальный

обменно-корреляционный функционал? Как сильно могут измениться результаты расчетов, если учитывать нелокальный вклад в обменную энергию?

2. В работе все вычисления проводятся на основе метода псевдопотенциалов с использованием в качестве базисных функций плоские волны. Можно применять другие базисные функции как, например, в методе присоединенных волн или проекционных присоединенных волн. Возникает вопрос об обоснованности выбора плоских волн к низкоразмерным системам, который не обсуждается в тексте диссертации. Мне кажется, что этот вопрос заслуживает более подробного рассмотрения.

Перечисленные вопросы и замечания не ставят под сомнение общую положительную оценку диссертационной работы, в которой логика изложения материала соответствует поставленным целям.

Заключение по работе

Содержание диссертации полностью соответствует специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, п.1 «Теоретическое изучение физической природы свойств ... неорганических 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» и п.3 «... прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения» 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 в УрФУ».

На использованные в диссертации результаты других авторов, в том числе, полученные при проведении совместных исследований, диссертантом, даны соответствующие ссылки. Личный вклад автора в диссертационную работу не вызывает сомнений. Диссертация Лэй Сюе, на взгляд рецензента,

является законченной научно-квалификационной работой, которая содержит новые результаты, имеющие существенное значение для развития страны.

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

Даю согласие на обработку моих персональных данных.

Официальный оппонент, заведующий кафедрой строительной механики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», доктор физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, доцент, адрес: 620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19, Тел.: 8 (343)-375-45-33, E-mail: a.n.kislov@urfu.ru.

10 февраля 2021 г.

Кислов Алексей Николаевич

Подпись Кислова А.Н. заверяю /

УЧЁНЫЙ СЕКРЕТАРЬ
УРФУ
МОРОЗОВА В. А.

