

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Лэй Сюе «Modeling the influence of structure modification of low-size ZnO, β -C₃N₄, InSe, and single-layer 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

Диссертационная работа Лэй Сюе посвящена вычислительным исследованиям атомной и электронной структуры перспективных низкоразмерных сред оптики, электроники, фотокатализа. решению фундаментальных вопросов влияния модификации (легирования, создания дефектов, окисления, механических напряжений) на физические, химические, оптические свойства материалов с развитой поверхностью. Практическая актуальность работы связана с возможностью использования результатов в области создания элементов питания, химических технологий, медицины.

Обращает на себя внимание широкий охват объектов исследования (ZnO, β -C₃N₄, InSe, борофен), что позволило автору систематически изучить целый ряд эффектов модификации поверхности в материалах с различной структурой, типом химической связи, морфологией. Для достижения поставленных целей автором применен вычислительный метод теории функционала плотности, являющийся одним из наиболее достоверных и широко применяемых в физике конденсированного состояния

Автором получен ряд новых научных результатов, новизна и значимость которых несомненна. В частности, установлено, что в системе $\text{V}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$ основным фактором изменения оптических свойств (края фундаментального поглощения) является изменение параметров решетки с ростом концентрации V_x . Для структуры β -C₃N₄ показана чувствительность энергии межзонных переходов к атомному беспорядку (появлению вакансий углерода и азота, пассивации поверхности). Для борофена на основе пошагового моделирования окисления отдельных слоев определены особенности его химической устойчивости в условиях окружающей среды и физических свойств окисленных слоев. Показано, что окисление борофена приводит к модификации электронной структуры из металлической в полупроводниковую, что делает его перспективным материалом для солнечной энергетики. Особый интерес представляет полученный результат появления стабильного в условиях окружающей среды d_0 -магнетизма, вызванного неспаренными электронами на отдельных неокисленных атомах бора в β -модификации борофеновых листов. Для гибких мембран InSe продемонстрирована зависимость химической стабильности и адсорбционных свойств от ряда факторов, в том числе от структурных напряжений; этот результат важен для исследования свойств многих слоистых структур.

Полученные результаты позволили автору обосновать ряд выводов о способах повышения эффективности фотоактивных систем, а также подходов к разработке стабильных материалов фотоники, фотохимии, сенсоров. Важное значение для дальнейших исследований, по мнению рецензента, имеет отработанный автором подход для оценки химической стабильности гибких низкоразмерных систем.

Работа Лэй Сюе представляет собой законченное научное исследование, которое вносит вклад в понимание закономерностей атомной, электронной структуры и оптических свойств низкоразмерных сред; в работе получены новые результаты, представляющие научную значимость и практическую ценность. Защищаемые положения четко сформулированы и хорошо обоснованы. Текст автореферата хорошо структурирован и дает цельное представление о выполненной работе.

Представленные в автореферате результаты, а также их интерпретация свидетельствуют о том, что диссертационная работа Лэй Сюе «Моделирование влияния модификации структуры низкоразмерных материалов ZnO, β -C₃N₄, InSe и однослойного бора на их физические свойства» удовлетворяют требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

20 февраля 2021 г.

Щапова Юлия Владимировна,

кандидат физико-математических наук по специальности 01.04.07, доцент,
ведущий научный сотрудник, и.о. заведующего лабораторией физических и химических методов исследования минерального вещества

Институт геологии и геохимии Уральского отделения Российской академии наук
620016, г. Екатеринбург, ул. Академика Вонсовского, 15, тел. +7(343)287-90-12

Сайт организации <http://www.igg.uran.ru/>

e-mail организации director@igg.uran.ru

Я, Щапова Юлия Владимировна, даю согласие на обработку моих персональных данных.



20.02.2021

— Ю.В.Щапова

