

Фамилия, имя, отчество	Сорокин Павел Борисович
Должность, ученая степень, ученое звание	Заведующий лабораторией, профессор, д.ф.-м.н., доцент
Корпоративная электронная почта	<a href="mailto:pbsorokin@misis.ru">pbsorokin@misis.ru</a>
Рабочий телефон	+7(495)9550063 внутр. 040-63
Область научных интересов	Вычислительное материаловедение
Трудовая деятельность – год, организация, должность	2005-2007 – Институт биохимической физики РАН, Москва, Россия – Младший научный сотрудник 2007-2010 – Сибирский федеральный университет, Красноярск, Россия – Старший преподаватель 2010-2011 – Университет Райса, Хьюстон, Техас, США – Постдок 2011-2016 – ФГБНУ Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов, Москва, Троицк, Россия – Старший научный сотрудник 2016-н.в. – НИТУ МИСИС, Москва, Россия – Ведущий научный сотрудник, заведующий лабораторией, профессор кафедры
Образование Дополнительное образование	Бакалавр физики – Красноярский государственный университет, Красноярск, Россия Магистр физики – Красноярский государственный университет, Красноярск, Россия Кандидат физико-математических наук – Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН (ФИАН), Москва, Россия Доктор физико-математических наук – Физико-химический институт им. Л.Я. Карпова, Москва, Россия
Основные результаты деятельности (перечисление достигнутых результатов)	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Изучена трансформация электронной структуры графена в полупроводниковое состояние при формировании на нём сверхрешеток из периодически хемосорбированных линий атомов водорода.</li> <li>• Предложен новый концепт химически индуцированного фазового перехода из многослойного графена в двумерную алмазную плёнку без приложения внешнего давления.</li> <li>• Показано, что модуль жёсткости графена может увеличиваться более чем в два раза при внедрении точечных дефектов.</li> <li>• Исследованы гетероструктуры графен/LSMO, графен/YIG графен/CFGG с увеличенным магнитным моментом на границе раздела, что делает их перспективными для спинтронных устройств.</li> <li>• Предложен и теоретически описан новый механизм измерения хиральности углеродных нанотрубок при их пластической деформации.</li> <li>• Была показана общая тенденция графитизации в сверхтонких пленках с ионным типом связи. Определена критическая толщина графитизации для ряда соединения, меньше которой происходит</li> </ul>

	<p>спонтанный переход кубической фазы в слоистую графитоподобную фазу.</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Изучена атомная структура 2D кластеров оксида меди моноатомной толщины и исследованы их полупроводниковые и магнитные свойства.</li> <li>• Изучен новый класс одномерных монокристаллические материалов: <math>M_2X_3Y_8</math> нанопровода (<math>M=V, Nb, Ta; X=Ni, Pd, Pt; Y=S, Se</math>).</li> <li>• Показано атмосферная нестабильность монослоя дисульфида молибдена. Предсказано, что атомы кислорода самопроизвольно входят в базовую плоскость отдельных слоёв <math>MoS_2</math> когда плёнки находятся в окружающей среде, в результате чего образуются двумерный твёрдый раствор <math>MoS_{2-x}O_x</math>. Области замещения кислорода, присутствуют по всей плоскости плёнки и представляют собой одноатомные реакционные центры, существенно увеличивающие каталитическую активность всей плоскости <math>MoS_2</math> для электрохимической реакции выделения <math>H_2</math></li> </ul>
<p>Значимые исследовательские/преподавательские проекты, гранты (тема, заказчик, год, полученные результаты)</p>	<p>Исследование путей создания и свойств монокристаллической алмазной плёнки нанометровой толщины – НИР ФЦП 14.В37.21.1645 – 2012-2013</p> <p><i>Изучены электронные свойства сверхтонких алмазных плёнок (САП) с различными пассивирующими атомами (фтор, водород и другие группы), а также их влияние на электронные свойства. Рассмотрены плёнки с поверхностями (111), (110), (112), их стабильность и физические свойства. Изучены механические свойства САП с разной кристаллографической ориентацией и толщиной, включая упругие константы и предел прочности на разрыв. Исследовано влияние механического напряжения на электронные свойства САП, включая изменение ширины запрещённой зоны. Также рассмотрены акустические, электромеханические и температурные свойства для применения в акустоэлектронике и сенсорах.</i></p> <p>Инфраструктурный проект «Теоретическое материаловедение наноструктур». Программа повышения конкурентоспособности НИТУ МИСИС среди ведущих мировых научно-образовательных центров – № К2-2015-033 – 2015-2017</p> <p><i>Изучены новые наноструктуры - 2D CuO, 1D Ta<sub>2</sub>Pt<sub>3</sub>Se<sub>8</sub> и Ta<sub>2</sub>Pd<sub>3</sub>Se<sub>8</sub>, гетероструктуры графен/MoS<sub>2</sub>, графен/VS<sub>2</sub>, C/BN, BNO, эффект ионной графитизации, флексоэлектрический эффект, индуцирование спиновой поляризации в графене, эффект повышения (более чем в два раза) модуля жёсткости графена</i></p> <p>Особенности свойств новых двумерных материалов – РФФИ 16-32-60138-мол_a_дк – 2016-2018</p> <p><i>Изучены новые квазидвумерные ван дер ваальсовы гетероструктуры. Был детально изучен эффект расщепления тонких</i></p>

*пленок FeO на отдельностоящие плоские монослои, обладающие нетипичной орторомбической решеткой.*

*В ходе экспериментально-теоретического исследования был изучен процесс образования новой двумерной наноструктуры  $MoS_{2-x}O_x$ . Изучены различные неуглеродные наноструктуры – наночастицы на основе нитрида бора и оксида цинка, нанопровода на основе кремния-германия, BN наноконусы*

Инфраструктурный проект «Теоретическое материаловедение наноструктур». Программа повышения конкурентоспособности НИТУ МИСИС среди ведущих мировых научно-образовательных центров – № К2-2017-001 – 2017-2018

*Изучена перпендикулярная магнитная анизотропия индуцированная в интерфейсе в наночастицах Co на h-BN полученном на Pt(111). Изучены механические свойства гибридных BN-C нанотрубок при внешнем механическом воздействии. Исследованы свойства углеродных нанотрубок на подложке LSMO. Предложена методика синтеза массивов графеновых квантовых точек, содержащих нанопоры нанометровых размеров в ионных треках со стабильными фторированными краями*

Исследование новых классов наноматериалов с необычной структурой: плёнки моноатомной толщины на основе d-металлов и квазиодномерные ван-дер-ваальсовы нанопровода и наноленты состава  $M_2X_3$  и  $M_2X_3Y_8$  – РФФ 17-72-20223 – 2017-2020

*Получены разнообразные данные о свойствах двумерных металлов и их соединений. Изучено формирование двумерной плёнки лития и щелочных металлов между слоями графена. Предсказана новая фаза карбида кобальта с орторомбической структурой и её свойства. Исследованы наноленты  $Ta_2Pd_3Se_8$  и  $Ta_2Pt_3Se_8$ , разработана методика их получения. Показана динамическая нестабильность монослоев d-металлов (Sc-Zn и Y-Cd) в свободном состоянии и их стабилизация графеном. Исследованы механические и электронные свойства двухслойного графена и  $MoS_2$  с интеркалированными щелочными металлами. Предсказана стабильность двумерной орторомбической фазы карбида кобальта, её упругие и магнитные свойства. Изучена каталитическая активность карбидов кобальта и меди. Рассмотрены двумерные оксиды железа и меди, их магнитные свойства и стабильность в графеновой матрице. Исследована возможность формирования нанопор в многослойном графене. Изучены материалы состава  $M_2X_3Y_8$  ( $M=V, Nb, Ta; X=Ni, Pd, Pt; Y=S, Se$ ), их упругие, электронные и атмосферные свойства.*

Исследование соединения сплавов Гейслера и ряда низкоразмерных материалов для использования в спинтронике – РФФИ 18-32-20190 – 2019-2020

*Изучены спин-зависимые электронные свойства гетероструктур, состоящих из двумерных материалов и полуметаллических сплавов Гейслера. Выявлено, что  $Co_2FeGe_{1/2}Ga_{1/2}$  (CFGG) обладает наибольшим потенциалом для создания границы раздела однослойный*

*графен/CFGG. Монослой графена находится в квазисвободном состоянии, а прилегающие слои CFGG сохраняют устойчивые ферромагнитные свойства, полуметаллическую зонную структуру и высокий уровень спиновой поляризации. Расчёт квантовой проводимости в магнитных гетеросоединениях типа CFGG/графен/CFGG показал возможность наблюдения эффекта магнетосопротивления. Исследование магниторезистивных переходов для соединений полуметаллического сплава CFGG с 2D h-BN и MoS<sub>2</sub> подтвердило, что гетероструктуры CFGG/h-BN/CFGG и CFGG/графен/CFGG обладают схожими свойствами. Расчёт транспортных свойств гетеросоединения CFGG/MoS<sub>2</sub>/CFGG показал туннельное магнетосопротивление до 200%, что делает такие структуры перспективными для спинтронных приложений.*

Инфраструктурный проект «Поиск и предсказание новых низкоразмерных структур и исследование их физико-химических свойств». Программа повышения конкурентоспособности НИТУ МИСИС среди ведущих мировых научно-образовательных центров – № К2-2019-016 – 2019-2020

*Проведено исследование электронных свойств новых наноструктур на основе двухслойных графеновых нанолент с порами, включая их проводящие, оптические свойства и флексоэлектрический дипольный момент на границах нанопор. Рассмотрены гидрированные биграфеновые структуры с углами разориентировки 29,4 и 27,8°, изучены их структурные особенности. Исследован процесс адгезии углеродных нанотрубок на различных поверхностях и нестехиометрические фазы двумерных дихалькогенидов переходных металлов, фторированный нитрид бора и алмазные нанокластеры. Определены условия для фазового перехода плёнок BN, SiC, AlN, GaN. Исследовано взаимодействие наночастиц платины с дисульфидом молибдена для электрохимического получения водорода. Также исследована возможность использования 2D кристаллов дихалькогенидов переходных металлов с гетероатомами в качестве высокоэффективных электрокатализаторов.*

Исследование образования новых квазидвумерных наноструктур при химически индуцированном фазовом переходе – Грант Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых и по государственной поддержке ведущих научных школ Российской Федерации – МД-1046.2019.2 – 2019-2020

*Были определены типы наиболее выгодных упаковок и положения атома водорода на поверхности гексагональных BN, AlN, GaN. Рассчитаны давления и оценены энергетические барьеры перехода для гексагональных нитридов в кубические (BN), вюрцитные и хаекелитные (AlN, GaN). Описана фазовая трансформация BN, AlN, GaN из графитоподобной плёнки в структуру типа сфалерит или вюрцит при химической адсорбции атомов на поверхности.*

Теоретическое исследование спиновых эффектов в новых магнитных гетеросоединениях – РФФИ 20-32-90049 – 2020-2022

	<p><i>Проведено комплексное исследование электронных свойств новых наноструктур на основе двухслойных графеновых нанолент с порами. Изучены проводящие свойства методом распространения волновых пакетов. Исследованы нестехиометрические фазы двумерных дихалькогенидов переходных металлов, фторированный двумерный нитрид бора и алмазные нанокластеры. Проведен анализ химически индуцированных фазовых переходов плёнок BN, SiC, AlN, GaN. Изучено взаимодействие наночастиц платины с дисульфидом молибдена для электрохимического получения водорода. Оценена величина флексоэлектрического дипольного момента на границах нанопор. Рассмотрены гидрированные биграфеновые структуры и диаманты с углами разориентировки 29,4 и 27,8°. Изучена возможность использования 2D TMC-кристаллов с гетероатомами как высокоэффективных электрокатализаторов. Исследованы магнитные моменты атомов металлов в сплавах Гейслера и энергетика внедрения щелочных металлов в двухслойный графен.</i></p> <p>Ион-имплантированные двумерные материалы для одноцентрового катализа – РФФИ 20-52-76018 ЭРА_т (международный проект ERA.Net RUS plus) – 2021-2022</p> <p><i>Изучены методы синтеза 2D h-BN и h-BN<sub>x</sub>O<sub>y</sub> с помощью CVD, плазмохимической реакция BCl<sub>3</sub> и NH<sub>3</sub>, и прямой реакцию борной кислоты с аммиаком. Показана эффективность синтеза нанокристаллического h-BN размером 6-10 нм в аммиаке. Исследована функционализация h-BN водородом и хлором/фтором при высоких температурах и в растворе плавиковой кислоты, создающая структурные дефекты. Также изучен метод формирования 2D B<sub>x</sub>C<sub>y</sub>N<sub>z</sub> с высокой концентрацией дефектов, который проявляет перспективные каталитические свойства. Теоретически исследована активность включений атомов металла в h-BN и BCN с учетом их магнитного момента и энергетического профиля для процесса окисления метанола.</i></p> <p>Химически индуцированный фазовый переход в низкоразмерных структурах – РФФИ 21-12-00399 – 2021-2023</p> <p><i>Исследование подтвердило возможность формирования двумерного алмаза на поверхности биграфена при осаждении водорода, проявляющееся в островковом образовании. Теоретические исследования расширили понимание процессов образования двумерного алмаза. Создан прототип мемристора на базе графен/диамант/графен и изучены его характеристики. Организована международная конференция "New carbon nanomaterials: ultrathin diamond films" с обсуждением последних результатов и тенденций развития в области двумерного алмаза. Исследованы фазовые переходы в биграфенах и эффекты облучения электронным пучком, включая резистивное переключение и образование барьеров для носителей заряда. Изучена также возможности образования двумерного алмаза в структуре Pd/биграфен/Pd.</i></p>
<p>Значимые публикации (список, не более 10)</p>	<p>1. Значимые публикации</p>

- I. Tang D.M., Erohin S.V., Kvashnin D.G., Demin V.A., Cretu O., Jiang S., Zhang L., Hou P.X., Chen G., Futaba D.N., Zheng Y., Xiang R., Zhou X., Hsia F.C., Kawamoto N., Mitome M., Nemoto Y., Uesugi F., Takeguchi M., Maruyama S., Cheng H.M., Bando Y., Liu C., **Sorokin P.B.**, Golberg D. Semiconductor nanochannels in metallic carbon nanotubes by thermomechanical chirality alteration // *Science* 2021, V.374, № 6575, P. 1616–1620
- II. Erohin S.V., Ruan Q., **Sorokin P.B.**, Yakobson B.I. Nanothermodynamics of chemically induced graphene-diamond transformation // *Small*, 2020, V. 16, № 47, P. 2004782
- III. Li S., Larionov K.V., Popov Z.I., Watanabe T., Amemiya K., Entani S., Avramov P.V., Sakuraba Y., Naramoto H., **Sorokin P.B.**, Sakai S. Graphene/half-metallic Heusler alloy: a novel heterostructure towards high-performance graphene spintronic devices // *Adv. Mater.* 2020, V. 32, № 6, P.1905734
- IV. Vancsó P., Popov Z.I., Pető J., Ollár T., Dobrik G., Pap J.S., Hwang C., **Sorokin P.B.**, Tapasztó L. Transition metal chalcogenide single layers as an active platform for single-atom catalysis // *ACS Energy Letters* 2019. V. 4, № 8, P. 1947-1953
- V. Pető J., Ollár T., Vancsó P., Popov Z.I., Magda G.Z., Ollár T., Dobrik G., Hwang C., **Sorokin P.B.** and Tapasztó L. Spontaneous doping of the basal plane of MoS<sub>2</sub> single layers through oxygen substitution under ambient conditions // *Nature Chemistry*, 2018. V. 10, P. 1246-1251
- VI. Nebogatikova N.A., Antonova I.V., Erohin S.V., Kvashnin D.G., Olejniczak A., Volodin V.A., Skuratov A.V., Krashenninnikov A.V., **Sorokin P.B.**, Chernozatonskii L.A. Nanostructuring few-layer graphene films by swift heavy ions for electronic application: tuning of electronic and transport properties // *Nanoscale*, 2018. V.10, P.14499-14509
- VII. Sakai S., Erohin S.V., Popov Z.I., Haku S., Watanabe T., Yamada Y., Entani S., Li S., Avramov P.V., Naramoto H., Ando K., **Sorokin P.B.**, Yamauchi Y. Dirac cone spin polarization of graphene by magnetic insulator proximity effect probed with outermost surface spin spectroscopy // *Advanced Functional Materials*, 2018. V. 28, P. 1800462
- VIII. Weng Q., Kvashnin D.G., Cretu O., Zhou M., Zhang C., Tang D.M., **Sorokin P.B.**, Bando Y., Golberg D. Tuning of the optical, electronic, and magnetic properties of boron nitride nanosheets with oxygen doping and functionalization // *Adv. Mater.*, 2017. V. 29, № 28, P. 1700695
- IX. Sakai S., Majumdar S., Popov Z.I., Avramov P.V., Entani S., Hasegawa Y., Yamada Y., Huhtinen H., Naramoto H., **Sorokin P.B.**, Yamauchi Y. Proximity-induced spin polarization of graphene in contact with half-metallic manganite // *ACS Nano*, 2016. V. 10, № 8, P. 7532-7541
- X. Hu J., Liu X., Yue C.L., Liu J.Y., Zhu H.W., He J.B., Wei J., Mao Z.Q., Antipina L.Yu., Popov Z.I., **Sorokin P.B.**, Liu T.J., Adams P.W., Radmanesh S., Spinu L., Ji H. and D. Natelson. Enhanced electron coherence in atomically thin Nb<sub>3</sub>SiTe<sub>6</sub> // *Nature Physics* 2015, V. 11, № 6, P. 471-476

Индекс Хирша	37
Количество статей	188
SPIN РИНЦ	1701-5423
ORCID	0000-0001-5248-1799
ResearcherID	C-9749-2011
Scopus AuthorID	9277558700
Значимые патенты	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Ноу-хау 25-774-2023</li> <li>2. РИД 2023687670</li> <li>3. РИД 2024662047</li> </ol>
Научное руководство/ Преподавание	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Научное руководство <p>Пренас В.А. – Модификация углеродных плёнок нанометровой толщины путём облучения тяжёлыми ионами – бакалавр – 2021</p> <p>Ларионов К.В. – Теоретическое исследование свойств границ раздела в углеродсодержащих структурах различной размерности – магистр – 2018</p> <p>Пашкин Е.Ю. – Исследование свойств новых соединений на основе углерода атомистическими методами моделирования – магистр – 2018</p> <p>Бондаренко С.В. – Исследование новых пьезоэлектрических материалов на основе AlN – магистр – 2018</p> <p>Хабибрахманов А.И. – Теоретическое исследование механических свойств алмазоподобных углеродных наноструктур – магистр – 2020</p> <p>Суханова Е.В. – Исследование особенностей атомной геометрии и электромеханических свойств различных 1D наноструктур – магистр – 2020</p> <p>Жуков В.В. – Исследование стабильности новых углеродных фаз на основе фуллеренов и алмаза – магистр – 2021</p> <p>Pereda J.J.P. – Исследование спиновых свойств соединений двумерных материалов со сплавами Гейслера – магистр – 2021</p> <p>Квашнин А.Г. – Первопринципные исследования структуры и свойств квазидвумерных наноструктур – к.ф.-м.н. – 2016</p> <p>Квашнина Ю.А. – Моделирование атомной структуры и физических свойств ряда аллотропных форм углерода методами теории функционала электронной плотности и эмпирических потенциалов – к.ф.-м.н. – 2018</p> <p>Ерохин С.В. – Теоретическое описание механизмов перестройки атомной структуры ряда двумерных кристаллов на примере графена, GaN и AlN – к.ф.-м.н. – 2021</p> <p>Ларионов К.В. – Теоретическое исследование структурных, электронных и магнитных свойств новых низкоразмерных соединений на основе переходных металлов – к.ф.-м.н. – 2022</p> </li> <li>2. Преподавание <p>«Математическое моделирование материалов» (2021-2022)</p> <p>«Компьютерные и информационные технологии в науке и производстве» (2022-2023)</p> <p>«Основы моделирования на атомном уровне» (2024-...)</p> <p>«Практическое применение теории функционала электронной плотности» (2024-...)</p> </li> </ol>