

Отзыв официального оппонента

на диссертационную работу Шунаева Владислава Викторовича
**«Электронные свойства и энергетические параметры
модифицированных графен-фуллереновых комплексов с позиции
применения в наноэлектронике»**,
представленную на соискание степени кандидата физико-математических
наук по специальности 05.27.01 – «Твердотельная электроника,
радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на
квантовых эффектах»

Диссертационная работа Шунаева В.В. посвящена теоретическому прогнозированию влияния модификации графен-фуллереновых комплексов на их функциональность с целью развития и улучшения элементной базы наноэлектроники. Поставленные в работе задачи являются актуальными, поскольку создание новых моделей таких устройств, как транзисторы, элементы памяти и ультратонкие дисплеи подразумевает знание особенностей электронной структуры их элементной базы – графен-фуллереновых комплексов.

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав и заключения. Во введении обосновывается актуальность работы и практическая значимость результатов, формулируется цель работы, приводятся основные выводы и положения, выносимые на защиту, а также рассказывается об апробации и научной новизне работы.

В первой главе рассказывается о методах математического моделирования, используемых в работе. Моделирование динамики исследуемых объектов проводилось в рамках классического метода молекулярной динамики. Для расчета энергетического потенциала рассматриваемых систем был использован полуэмпирический метод сильной связи с оригинальной параметризацией, метод функционала плотности в приближении сильной связи DFTB, а также метод порядка связи REBO. В данной главе дано обоснование выбора того или иного метода для решения поставленных в работе задач.

Вторая глава посвящена исследованию механизма модификации моно- и бислойного графена кислородосодержащими группами. Найдены такие энергетические характеристики присоединения кислорода к моно- и бислойному графену, как энергия связи, энергия активационного барьера и энтальпия реакции. Установлена зависимость энергии связи графена с

кислородом от радиуса его кривизны. В результате моделирования прогиба графена иглой атомно-силового микроскопа было установлено влияние деформации прогиба на электронные и механические свойства кластера. Показано, что прогиб графенового кластера улучшает его селективные свойства. На основании полученных результатов предложена технология модификации графена кислородом.

Третья глава посвящена методам манипуляции графен-фуллереновыми объектами. В ее первой части описывается способ управления движением фуллереном по поверхности графена на кремниевой подложке. Была изучена электронная структура комплекса графен+фуллерен, было показано, что в процессе движения с графена на фуллерен перетекает электрический ток. В пункте 3.2 рассказывается о закономерностях поведения бислойных фуллеренов с внешней икосаэдрической оболочкой. Установлены величины потенциальных ям, в которых может располагаться внутренний фуллерен, найдена зависимость частоты перескока внутреннего фуллерена между потенциальными ямами внешней оболочки от температуры.

В заключении представлены основные результаты и выводы диссертационной работы.

Результаты достаточно полно опубликованы в рецензируемых научных изданиях из перечня ВАК, а также доложены на конференциях. Несомненным плюсом работы является то, что она выполнена в рамках нескольких научно-исследовательских грантов.

Диссертационная работа оставляет хорошее впечатление: автор грамотно использует различные методы математического моделирования для выполнения поставленных задач, а также дает трактовку полученных результатов.

Автореферат соответствует содержанию диссертации.

Представленные в работе результаты обладают научной новизной:

- 1) Была получена зависимость энергии активационного барьера и энергии связи эпоксильной и гидроксильной групп с графеном в зависимости от его кривизны. Были рассчитаны такие энергетические характеристики, как энтальпия реакции, энергия связи и энергия активационного барьера присоединения эпоксильной и гидроксильной групп к бислойному графену.

2) Установлены предельная прочность на разрыв и критическое напряжение бислойного графена в результате моделирования прогиба иглой атомно-силового микроскопа.

3) Подтверждено, что движением фуллерена по графену можно управлять изменением гофрированности подложки и с помощью внешнего электрического поля. Обнаружен молекулярный ток между графеном и движущимся по нему фуллереном C_{60} .

4) Установлены закономерности поведения фуллерена внутри внешней икосаэдрической оболочки на примере углеродных нанокластеров $C_{20}@C_{240}$ и $C_{60}@C_{540}$ с учетом влияния внешнего фактора (температуры).

К данной работе я могу высказать следующие замечания.

При анализе электронных свойств графена при прогибе платиновой пирамидой, объектом исследования является, по сути, малый кластер. Вычисляются расстояние между последним заполненным уровнем (HOMO) и первым свободным (LUMO), а также потенциал ионизации. По характеру их изменения делается вывод о том, что "деформация прогиба способствует улучшению эмиссионной способности графеновых листов" и "графен, подвергнутый деформации прогиба, сохраняет свойства хорошего металлического проводника". Данные выводы вызывают определенные сомнения, связанные со следующим: на основании вычисления характеристик малого кластера автор делает выводы общие для протяженной структуры. При этом ясно как происходит прогиб кластера и совершенно не очевидно, какое аналогичное действие должно быть произведено с бесконечной структурой. Возникают естественные вопросы: это должен быть один глобальный прогиб чем-то соизмеримым с размерами протяженного листа или несколько малых точечных прогибов малыми пирамидками? Если верно последнее, то сколько деформированных участков в структуре должно быть, чтобы сделанные выводы были справедливы? Как должны располагаться деформированные участки, хаотично или упорядочено, и влияет ли данное обстоятельство на высказанные утверждения? Мне кажется, делая такие утверждения относительно электронных свойств автор действует по аналогии - он переносит подход, используемый при исследовании механических свойств на проблему исследования электронных характеристик, что не является корректным.

При исследовании плотности состояний комплекса графен+фуллерен на рис. 3.4 приведены плотность состояний для графенового кластера и

фуллерена. Фуллерен это квантовая точка, и если он ни с чем не взаимодействует, время жизни электронов на уровнях должно быть бесконечно, соответственно пики DOS должны быть дельта-функциями. Однако на рисунке пики DOS для уединенного фуллерена конечной ширины, возникает вопрос - чем это вызвано?

В автореферате к диссертации утверждается, что "основные результаты диссертации изложены в научных журналах из перечня ВАК", далее идет список из 14 работ. Причем одна из работ - Prytkova T.R., Shunaev V.V., Glukhova O.E., Kurnikov I. Donor/Acceptor Coupling Shortcuts in Electron Transfer within Ruthenium-Modified Derivatives of Cytochrome b562 // The Journal of Physical Chemistry B. – 2015. – Vol. 119. – P. 1288–1294, не имеет ни какого отношения к "основным результатам диссертации" и включена в список, видимо, для солидности.

На зависимости энергии связи от кривизны на рис. 2.3 для ОН группы имеет место явный скачек, в тексте очевидно не хватает указания на возможные причины его появления.

Автор пренебрегает поиском адекватного аналога для многих англоязычных терминов, довольствуясь их транслитерацией или дословным переводом. В результате этого, в тексте фигурируют такие забавные сочетания как "сумма занятых орбитальных энергий" (что такое "занятая энергия"?!), "отталкивательное взаимодействие", "явление электронного трансфера", "трансмиссионная электронная микроскопия", armchair, zigzag (все же в русскоязычной литературе сейчас пишут в основном "кресло" и "зигзаг"), наноидентирование и т.п.

Вводные слова в данной работе обособляются запятыми далеко не со стопроцентной вероятностью.

Неясно, что автор имеет в виду под пи-электронами в разделе "Пи-электронное приближение метода сильной связи". В тексте работы автор также пишет "пи-электронное облако". Существует "пи-связь", существуют pz-орбитали, но термин пи-электроны не встречается в литературе.

Присутствуют проблемы форматирования текста и формул, например на с. 11 вместо ссылки стоит слово "(ссылка)", в выражениях 1.20, 1.21, 1.50 есть очевидные проблемы с форматированием формул.

Однако отмеченные замечания не снижают общего весьма положительного впечатления от работы, которая представляет собой завершённое научное исследование, в ходе которого решен ряд актуальных задач области твердотельной электроники.

Считаю, что диссертационная работа соответствует требованиям пп.9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года, №842, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Шунаев Владислав Викторович, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.27.01 – «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах»

09.09.2016

Официальный оппонент

Старший научный сотрудник

Лаборатории Теоретической Физики

ОИЯИ г. Дубна

к.ф.-м.н.

Катков Всеволод Леонидович

Рабочий адрес: ЛТФ ОИЯИ, 141980 Дубна, Московской обл., Россия

e-mail: katkov@theor.jinr.ru

Подпись сотрудника ЛТФ ОИЯИ В.Л. Каткова
заверено.

Удостоверенный секретарь ЛТФ ОИЯИ А.В. Андрианов

