

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по научной работе МИЭТ

д.т.н., профессор

Гаврилов С.А.

« 7 » сентября 2016 г.



Отзыв ведущей организации
на диссертационную работу Шунаева Владислава Викторовича
**«Электронные свойства и энергетические параметры
модифицированных графен-фуллереновых комплексов с позиции
применения в нанoeлектронике»,**

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.27.01 – «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах»

Развитие современной электроники тесно связано с углеродными наноструктурами, которые призваны прийти на смену кремниевым компонентам. Так, на основе графен-фуллереновых комплексов разработаны модели таких устройств, как вертикальные транзисторы, элементы памяти, ультратонкие дисплеи. Совершенствование данных моделей требует знаний электронной структуры их компонентов, а также возможностей управления ими. В связи с этим цель диссертационной работы Шунаева В.В. – теоретическое прогнозирование влияния модификации графен-фуллереновых комплексов на их функциональность с позиции перспектив применения в нанoeлектронике и при разработке приборов на квантовых эффектах нового поколения – является актуальной и практически значимой для приложения в области твердотельной электроники.

Диссертационная работа состоит из введения, трех содержательных глав, заключения и списка литературы.

Во **введении** обоснована актуальность выбора объекта и направления исследований, сформулированы цель и задачи, а также содержатся научная новизна и основные положения, выносимые на защиту.

В **первой главе** описаны современные методы математического моделирования наноструктур, дана историческая справка квантово-механических методов моделирования, а также их классификация. Автор работы подробно описывает используемые в работе методы (REBO, SCC DFTB, метод сильной связи), а также объясняет их выбор для решения поставленных целей и задачи. Все расчеты производились автором в программных пакетах RING и KVAZAR, разработанных на физическом факультете Саратовского государственного университета.

Вторая глава диссертационной работы Шунаева В.В. посвящена механизмам оксидирования моно- и бислойного графена кислородом.

Автором были впервые установлены энергетический барьер для модификации графена атомарным кислородом и ОН-группами в случае плоской и криволинейной (с различной степенью кривизны) атомной сетки. Было показано, что энергетически более выгодным является процесс окисления искривленного графена, а отрыв кислорода, напротив, более выгоден для плоского графена. Указанный результат имеет важное практическое значение, поскольку может быть использован при разработке методов восстановления графена из оксида графена. Автором был проведен численный эксперимент, заключающийся в прогибе моно- и бислойного графена иглой атомно-силового микроскопа. Автором было показано, что в процессе прогиба эмиссионная способность графена улучшается; графен без примесей сохраняет свойства бесщелевого проводника, однако добавление к нему кислорода открывает энергетическую щель. Впервые были установлены предельная прочность на разрыв и критическое напряжение моно- и бислойного графена. На основании полученных результатов автор предложил новый способ формирования требуемого паттерна проводящей пленки на графене модификацией кислородом. Полученные на основе таких пленок интегральные схемы могут быть использованы при создании вертикальных транзисторов.

Третья глава повествует о методах манипулирования графен-фуллереновыми комплексами. В ее первой части описан способ управления движением фуллерена по поверхности графена на силиконовой подложке. Показано, что движение фуллерена становится контролируемым, если сделать поверхность графена гофрированной, зарядить фуллерен инкапсулированием в него иона калия и приложить внешнее электрическое поле. Шаг и глубина рифлености подложки, а также величина внешнего электрического поля приводятся в работе. В ходе численного эксперимента на основании методики Малликена рассчитывалось распределение плотности электронного заряда на графене и фуллерене. Показано, что с графена на фуллерен перетекает заряд, величина которого составляет 0.024-0.029e. Явление возникающего при перетекании заряда молекулярного тока можно использовать как новый физический принцип для создания новых устройств фотовольтаики. Во второй части главы установлены закономерности поведения бислойных фуллеренов C₂₀@C₂₄₀ и C₆₀@C₅₄₀. Найдены энергетический профиль взаимодействия бислойных фуллеренов, определены потенциальные ямы. Установлена зависимость частоты перескока внутреннего фуллерена между потенциальными ямами внешнего от приложенной температуры. Полученные результаты позволяют использовать бислойные фуллерены в различных электронных приложениях, в том числе в качестве электродов для конденсаторов и ионно-литиевых батарей, электронных сенсоров, для экранирования терагерцевых волн.

Основные результаты работы и выводы сформулированы в **заключении** диссертации. Среди них можно выделить следующие наиболее интересные моменты:

1) Создание паттерна интегральной схемы на графене предпочтительнее осуществлять либо модификацией его кислородом и/или ОН-группами на искривленной поверхности графена, либо отрывом кислородосержащих групп от плоского оксидированного монослоя графена. Кривизна сетки, как показано в диссертации, может создаваться, в частности, в результате локального прогиба иглой атомно-силового микроскопа.

2) Показано, что за счет изменения гофрированности подложки, сообщения фуллерену заряда и наложения внешнего электрического поля можно контролировать перемещение фуллерена по графену в фуллерен-графеновом комплексе.

3) Выявлено явление электронного трансфера от графена к фуллерену в графен-фуллереновых комплексах. Электронный трансфер изменяется вследствие движения самого фуллерена. Данный эффект является одним из физических принципов работы устройств фотовольтаики.

Практическая значимость результатов диссертационного исследования определяется возможностью их использования в устройствах твердотельной электроники и приборах на квантовых эффектах. Новая методика эффективного окисления графена прокладывает дорогу к созданию паттернов интегральных схем на основе графена, которые могут быть использованы в тонкопленочных транзисторах. Установленная зависимость частоты перескока внутреннего фуллерена между потенциальными ямами внешнего от температуры окружающей среды может быть использована для разработки нанотермодатчиков. Физическое явление перетекания заряда на фуллерен в процессе движения по графену можно использовать как новый физический принцип для разработки наноустройств, в частности вертикальных нанотранзисторов, а также устройств фотовольтаики.

По диссертационной работе имеются следующие замечания:

1) В работе имеют место опечатки. Например, Рис. 3.5 имеет название «Изменение заряда на фуллерене при его движении по графену: $T = 300$ К, шаг по времени – 5 фсек (светлая линия – плоская подложка, черная линия – гофрированная)», однако на самом рисунке линии синяя и зеленая.

2) Во второй главе на рис. 2.14 показана зависимость энергетической щели графенового листа от величины прогиба. Из рисунка видно, что данная величина энергетической щели варьируется от 0 до 0.09 эВ. Вместе с тем автор делает вывод что прогиб графен не влияет на величину энергетической щели. Автору следовало уделить этому моменту больше внимания.

3) В главе 3 автор рассматривает движение фуллерена по поверхности графена. При этом остается лишь догадываться, являлись ли атомы графена жестко закрепленными. В противном случае расчет бы занял длительное количество времени.

В то же время отмеченные замечания не снижают общей оценки диссертационной работы Шунаева В.В., которая выполнена на высоком уровне, и, безусловно, вносит весомый вклад в развитие углеродной наноэлектроники. Данная работа является законченным научным

исследованием, свидетельствующей о высокой квалификации соискателя. По результатам исследований, выполненных при работе над диссертацией, опубликовано 14 работ в журналах, рекомендованных ВАК, сделано 8 докладов на международных научно-технических конференциях. Автореферат диссертации полностью отражает ее содержание.

Таким образом, диссертационная работа Шунаева В.В. «Электронные свойства и энергетические параметры модифицированных графен-фуллереновых комплексов с позиции применения в нанoeлектронике» соответствует паспорту специальности 05.27.01 – «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах», отвечает требованиям пп.9-14 действующего «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждено Постановлением Правительства РФ №842 от 24 сентября 2013 г.), предъявляемых к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор В.В. Шунаев 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».

Отзыв составил: профессор, д.ф.-м.н., г.н.с. НОЦ «Зондовая микроскопия и нанотехнология» МИЭТ  Неволин В.К.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники».

Почтовый адрес: 124498, г. Москва, г. Зеленоград, площадь Шокина, дом 1.

Телефон: (499) 731-44-41.

Факс: (499) 710-22-33.

Телеграф: 124498, Москва, АТ 205264.

Электронная почта: netadm@miee.ru

Диссертация заслушана и отзыв утвержден на заседании научного семинара НОЦ ЗМНТ, протокол № 11 от 07.09.2016г.

Секретарь семинара, к.х.н. 

Волкова А.В.

ВЕРНО
НАЧ. ОТД. КАДРОВ
С. В. ЗАБОЛОТНЫЙ

