



Department of Radio Science
and Engineering
P.O. Box 13000
FI-00076 AALTO, Finland
tel: +358 9 470 22139

Aalto University

Отзыв официального оппонента

на диссертационную работу Шунаева В.В.

«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»

Диссертация Шунаева В.В. посвящена влиянию модификации графен-фуллереновых комплексов на их электронные свойства и энергетические параметры с целью развития и улучшения элементной базы нанoeлектроники. Так, на основании результатов, полученных Шунаевым В.В., предложена методика эффективного создания шаблонов интегральных схем на основе графена, а также предложен новый физический принцип для разработки наноустройств, в частности, вертикальных транзисторов. В связи с этим тема и цель диссертации Шунаева В.В. представляется актуальной как с научной, так и с практической точки зрения.

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения и списка используемой литературы. В **первой главе** автор подробно рассказывает об используемых в работе методах моделирования наноструктур, а также обосновывает их выбор. На мой взгляд, выбранные автором методы REBO, полуэмпирический метод сильной связи, а также гибридный метод SCC DFTB 2 хорошо зарекомендовали себя для изучения различных свойств углеродных наноструктур и вполне подходят для решения поставленной в диссертации задачи. Однако, имеючи в значительной степени обзорный характер, эта глава содержит немалое количество неудачно переведенных на русский язык терминов.

Во **второй главе** рассказывается о механизмах модификации моно- и бислойного графена кислородосодержащими группами. В данной главе определены энергетические характеристики присоединения эпоксильной и гидроксильной групп к монослойному и бислойному графенам, найдена зависимость этих параметров от радиуса кривизны монослойного графена. Проведенный численный эксперимент, заключающийся в прогибе графенового листа иглой атомно-силового микроскопа, позволил установить предельную силу на разрыв и критическое напряжение моно- и бислойного графена. Найдены зависимость энергетической щели и потенциала ионизации графенового листа от степени деформации. К **новым и наиболее важным и новым результатам второй главы** следует отнести:

1) Разработан новый способ формирования требуемого паттерна интегральной схемы на графене модификацией атомарным кислородом и ОН-группами участков атомной сетки с максимальной кривизной, соответствующей паттерну.

2) Установлено, что прогиб графена снижает потенциал ионизации, в предельном случае – на 0.1 эВ, что приводит к улучшению его эмиссионной способности.

3) Получены новые знания об электронных свойствах графена, модифицированного атомарным кислородом и ОН-группами: при концентрации кислорода 1.8% в электронном спектре графена открывается энергетическая щель 0.05 эВ, которая увеличивается при увеличении концентрации кислорода.

Третья глава представляется мне наиболее интересной и содержательной. Она поделена на два пункта. В пункте 3.1 рассказывается о способе контроля над перемещением фуллерена по графену на силиконовой подложке. Управлять движением фуллерена предлагается за счет изменения гофрированности подложки и внешнего электрического поля. Кроме этого, автором было установлено интересное физическое явление – перетекание заряда с фуллерена на графен, эффект который постоянно меняется с течением времени. В пункте 3.2 исследуются закономерности поведения фуллерена внутри внешней икосаэдральной оболочки. Найдены значения энергий потенциальных ям внешней оболочки, а также зависимость частоты перескока внутреннего фуллерена от приложенной к системе температуры. **К новым и наиболее важным и новым результатам третьей главы** следует отнести:

1) Установлено влияния двух факторов: гофрированности подложки и наличия внешнего электрического поля на обеспечение контроля движения эндоэдрального комплекса $A+C_{60}$.

2) Выявлено явление перетекания заряда от графена к фуллерену в графен-фуллереновых комплексах. Электронный транспорт изменяется вследствие изменения расстояния между фуллереном и графеном, таким образом, индуцируя электрический ток.

3) Установлены закономерности поведения бислойных фуллеренов $C_{20}+C_{240}$ и $C_{60}+C_{540}$, в том числе под действием температуры. Выявлена зависимость частоты перескока внутреннего фуллерена между потенциальными ямами внешней оболочки от температуры.

Подводя итог вышесказанному, диссертация Шунаева В.В. является, несомненно, законченным научным исследованием на актуальную тему. Вместе с тем при прочтении работы мною были сделанные следующие замечания:

- 1) В главе I используется латинская аббревиатура DOS без расшифровки что это такое.
- 2) Название п. 1.2.2. "Отталкивательное взаимодействие" звучит не совсем по-русски. Это же слово встречается и в других местах текста вместо "отталкивающее".
- 3) Стр. 38. "число занятости". Видимо автор имел в виду "число заполнения". На той же странице в предложении, после ф-лы (1.28), используются существительные в трех разных падежах (один из них правильный).

- 4) Стр. 39, Что такое "Однополюсный терм"? Это монополь или мультиполь первого порядка, т.е. диполь?
- 5) Стр. 42, фраза: "... обменно-корреляционное взаимодействие исчезает из-за аппроксимации локальной плотности". Как физическое взаимодействие может исчезнуть из-за аппроксимации? Наверное, правильнее сказать что данная аппроксимация не позволяет учесть это взаимодействие.
- 6) Стр. 46, в русском тексте латинские обозначения единиц измерения, *nm*.
- 7) Стр. 48, опечатки в формулах (1.50) и (1.51).
- 8) Стр. 51, непонятно что означает "бомбардировка озонового слова".
- 9) Таблицы 2.1 и 2.1. Непонятно в каких единицах указана длина связи.
- 10) Стр. 59-60. Из рисунка 2.2 невозможно увидеть что радиус кривизны графена может составлять два ангстрема.
- 11) Стр. 61: не понял что такое "наводораживание графена".
- 12) Вопрос по расчетам в третьей главе: учитывалось ли бесконтактное (квантовое) трение при движении фуллерена по графеновой поверхности?
- 13) Стр. 107: "Когда он (фуллерен) достигает края графена, он отражается от него отталкиваемый ван-дер-ваальсовым взаимодействием..." Откуда там возникает ван-дер-ваальсовское отталкивающее взаимодействие? Не является ли причиной отражения фуллерена от края то что он покидает зону притягивающего взаимодействия?
- 14) Номер страницы 126 повторяется дважды.

В целом отмеченные выше замечания носят достаточно частный характер и не снижают общего положительного впечатления о диссертационной работе. Личный вклад автора описан четко и однозначно. Автореферат соответствует содержанию диссертации. Приведенный список публикаций соответствует всем необходимым требованиям и включает 14 статей в научных журналах из перечня ВАК.

На основании вышеизложенного считаю, что диссертационная работа «Электронные свойства и энергетические параметры модифицированных графен-фуллереновых комплексов с позиции применения в нанoeлектронике» отвечает требованиям паспорта специальности 05.27.01 – «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах» и требованиям пп. 9-14 действующего «Положения о порядке присуждения ученых степеней», предъявляемых к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор Шунеаев В.В. 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».

Официальный оппонент

Старший научный сотрудник департамента Radioscience and Engineering ван-дер-ваальсовым взаимодействием

университета Аалто (Финляндия), д.ф.-м.н.

тел.: +358 442709251

e-mail: igor.nefedov@aalto.fi



Нефедов Игорь Сергеевич