

Review on the PhD thesis of V.V. Shunaev

"The electronic properties and energy parameters of modified graphene-fullerene complexes from the position of application in nano-electronics" submitted for the degree of candidate of physical and mathematical sciences on a specialty 05.27.01 – "Solid-state electronics, radio-electronic components, micro- and nanoelectronics, devices based on quantum effects".

In the Ph.D. thesis V. Shunaev investigated the electronic properties of graphene-fullerene complexes using first principle and atomistic simulations (density functional based tight binding method and MD simulations with REBO potential).

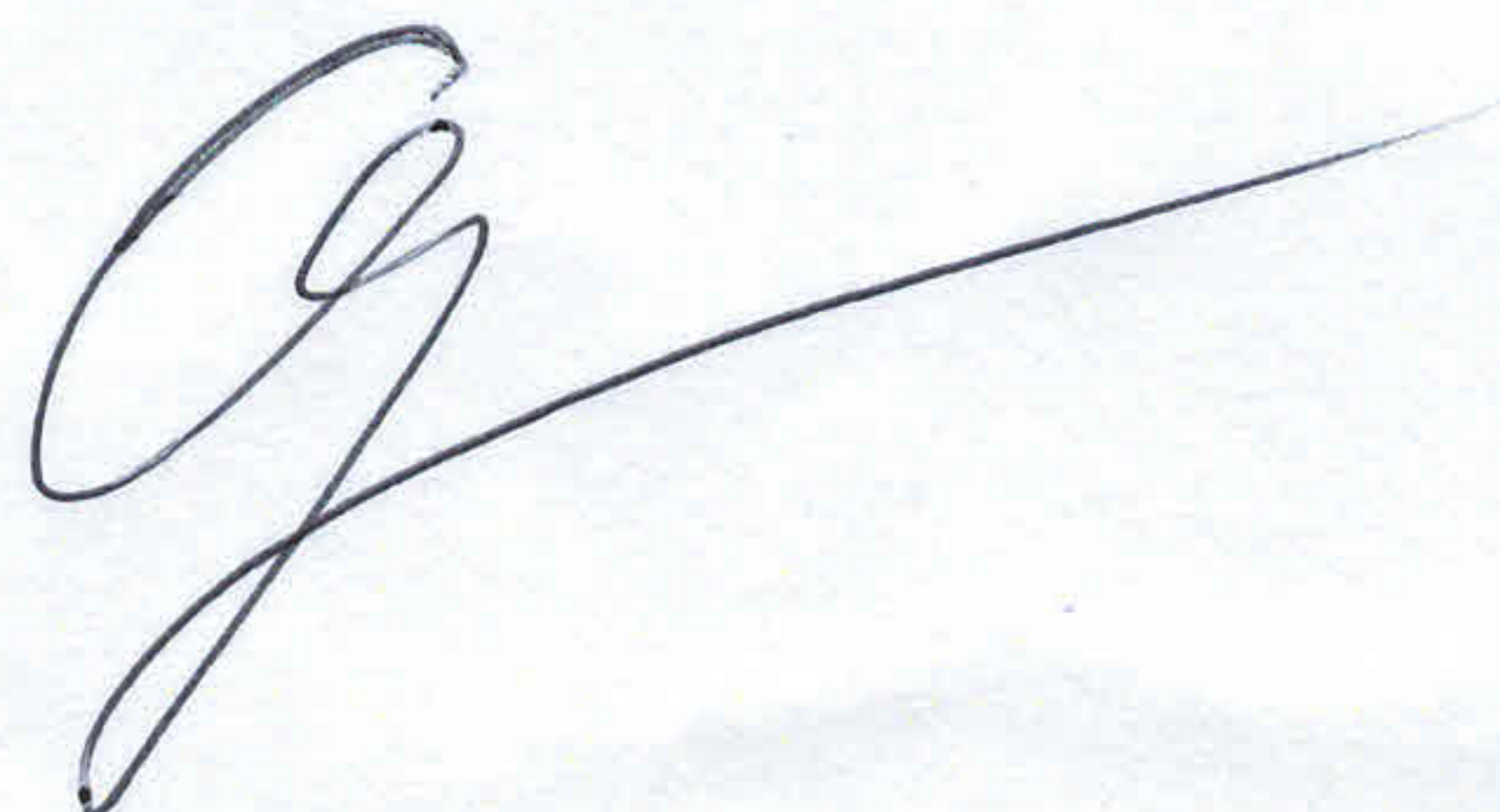
The most interesting results reported in the Ph.D. thesis include:

- The method for designing of integrated circuits in graphene by oxidation of the most deformed areas of graphene. V. Shunaev for the first time calculated the binding energy between oxygen and graphene and energy of activation barrier in oxidized graphene as a function of graphene curvature.
- Electron transfer from graphene to fullerene molecules transported along graphene, which depends on the distance between them.

However, it should be noted that V. Shunaev used the RING and the KVAZAR in-house developed simulation packages unknown to the general scientific audience to investigate graphene-fullerene complexes. The author should explain and justify his choice of these simulations packages instead of commonly used ones (VASP, Gaussian, Gromacs and LAMMPS).

Nonetheless vast number of the author's publications in high-impact international journals confirm that thesis by V. Shunaev meets all the necessary requirements of PhD thesis for the degree in physical and mathematical sciences, and degree of candidate of physical and mathematical sciences on a specialty 05.27.01 - "Solid-state electronics, radio-electronic components, micro- and nanoelectronics, devices based on quantum effects" can be awarded to the author.

Viacheslav Sorkin, Ph. D
Scientist, Institute of High Performance Computing
1 Fusionopolis Way,
16-16 Connexis North 138632, Singapore
sorkinv@ihpc.a-star.edu.sg



ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Шунаева В.В.
«Электронные свойства и энергетические параметры модифицированных графен-фуллереновых комплексов с позиции применения в наноэлектронике»,
представленную на соискание ученой 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 расчету электронных и энергетических параметров углеродных наноструктур, а именно, графен-фуллереновых комплексов. Для решения поставленной цели автор работы Шунаев В.В. использовал современные методы молекулярного моделирования SCC DFTB 2, REBO, метод сильной связи. Приятно, что в своей работе автор грамотно обосновал выбор того или иного метода.

Среди наиболее интересных результатов отмечаю следующие:

- найден способ формирования паттерна интегральной схемы на графена, заключающийся в окислении наиболее деформированных участков графена. Для получения данного результата автором впервые была найдена зависимость энергии связи и энергии активационного барьера графена с кислородом в зависимости от радиуса кривизны.
- в ходе движения фуллерена по графену обнаружено явление электронного трансфера от графена к фуллерену, которое меняется в зависимости от расстояния между объектами.

Вместе с тем, у меня есть небольшое замечание. Все расчеты осуществлялись в программных комплексах RING и KVAZAR, неизвестных широкой научной аудитории. Возможно, автору стоило отметить, почему он использовал именно эти пакеты вместо опробованных пакетов типа VASP, Gaussian, Gromacs, LAMMPS.

Однако высказанное замечание ни в коей мере не снижает достоинства и высокую оценку диссертационной работы Шунаева В.В. Автореферат и большой список публикаций автора в ведущих зарубежных журналах подтверждает, что диссертация Шунаева В.В. выполнена на высоком уровне и удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор – заслуживает присуждения ему степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.27.01 – «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах».

Соркин Вячеслав, Кандидат (PhD) физико-математических наук,
Научный сотрудник,
Institute of High Performance Computing,
1 Fusionopolis Way, #16-16 Connexis North 138632, Singapore
e-mail: sorkinv@ihpc.a-star.edu.sg

