



ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Савостьянова Георгия Васильевича «Закономерности протекания электрического тока в окислированных графеновых нанолентах типа «зигзаг» и разветвленных структурах на основе нанотрубок типа «кресло», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальностям 01.04.04 - «Физическая электроника» и 05.13.18 - «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Исследование свойств углеродных наноструктур, таких как графен, графеновые наноленты и углеродные нанотрубки, является актуальной задачей физической электроники, поскольку углеродные наноматериалы обладают уникальными электронными свойствами и большими перспективами применения в данной области. Необходимость использования методов математического моделирования для исследования электронного транспорта в наноструктурах связана с возможностью в рамках полноатомных моделей получить детальную информацию об атомном и электронном строении наноструктур без необходимости проведения сложных экспериментов на дорогостоящем оборудовании. Исследование влияния дефектов на электронную проводимость в наноструктурах имеет большое практическое значение, поскольку дефекты атомной решетки оказывают существенное влияние на электронные свойства наноструктур. По этой причине актуальными являются работы, реализуемые на стыке наук и посвященные исследованию физических явлений в наноструктурах методами математического моделирования.

Диссертационная работа Савостьянова Г.В. посвящена исследованию электронной проводимости окислированных графеновых нанолент типа «зигзаг» и разветвленных структур на основе нанотрубок типа «кресло». В работе решаются актуальные задачи физической электроники и математического моделирования, связанные с исследованием влияния примесей атомов кислорода на проводимость графеновых нанолент, определением влияния атомного строения соединений нанотрубок на величину контактного сопротивления, а также с развитием моделей и методов моделирования электронного транспорта в наноструктурах. Тема диссертации соответствует специальностям 01.04.04 - «Физическая электроника» и 05.13.18 - «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Научная новизна работы заключается в определении влияния краевых состояний на проводимость окислированных графеновых нанолент типа «зигзаг», выявлении зависимости электронных свойств нанолент от упорядоченности осажденных атомов кислорода, определении влияния структуры соединений между нанотрубками и степени упорядоченности нанотрубок на удельную электропроводность разветвленных структур из одностенных углеродных нанотрубок типа «кресло», разработке комплекса программ для математического моделирования электронных свойств и электропроводности наноструктур, основанного на использовании оригинальной вычислительной схемы. Достоверность полученных автором результатов обеспечивается корректностью используемых методов для описания атомной и электронной структуры углеродных многоатомных систем, согласованностью получаемых при расчетах энергетических и электрофизических характеристик рассматриваемых объектов с имеющимися

теоретическими и экспериментальными результатами, опубликованными в ведущих отечественных и зарубежных изданиях, широкой апробацией результатов работы.

Разработанный в рамках данной диссертационной работы комплекс программ обладает большой практической значимостью, поскольку он обладает большой базой реализованных вычислительных методов; предоставляет инструменты для исследования динамики, электронного строения и электропроводности наноструктур. Кроме того, на практике могут быть использованы обнаруженные условия образования участков нулевой локальной электронной плотности в графеновых нанолентах типа «зигзаг», в частности, для реализации ключевого режима работы нанотранзистора.

Содержание автореферата позволяет сделать вывод, что диссертация представляет собой целостную работу, результаты которой в должной мере опубликованы в отечественных и зарубежных научных изданиях. Следует отметить, что большая часть проведённых исследований осуществлялась при поддержке различных грантов.

Замечания по автореферату:

- В тексте автореферата не представлена информация об используемых методах расчёта взаимодействия между атомами: о методе SCC-DFTB, AIREBO и т.д.
- Из рис. 9 может следовать, что величина энергии Ферми остаётся постоянной относительно количества осажённых атомов кислорода, однако этот момент не комментируется.

Данные замечания не снижают общего положительного впечатления о диссертации.

Судя по автореферату, диссертация удовлетворяет требованиям, изложенным в пп. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», а её автор, Савостьянов Г. В., заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальностям 01.04.04 - «Физическая электроника» и 05.13.18 - «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Я, Прыткова Татьяна Романовна, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Прыткова Татьяна Романовна
Кандидат (Ph.D) химических наук
научный сотрудник
Cloud Pharmaceuticals, Inc.
6 Davis Drive
Research Triangle Park, NC 27709 (USA)
Телефон: +1 919.424.6894
e-mail: info@cloudpharmaceuticals.com



09.19.2018