

## ОТЗЫВ

### официального оппонента

на диссертационную работу Савостьянова Георгия Васильевича «Закономерности протекания электрического тока в оксидированных графеновых нанолентах типа «зигзаг» и разветвленных структурах на основе нанотрубок типа «кресло»», представленную 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»

Диссертационная работа Савостьянова Г.В. посвящена решению актуальных задач физической электроники и математического моделирования, связанных с изучением методами компьютерного моделирования процессов электронного транспорта в наноструктурах на примере углеродных нанотрубок и графеновых нанолент. Интерес к подобным структурам с точки зрения конструирования разнообразных устройств вакуумной и эмиссионной электроники, оптоэлектроники и биосенсорики постоянно растет, что обуславливает большое количество исследований электрофизических свойств углеродных нанотрубок и разветвленных твердотельных структур на их основе. Кроме того, за последние десять лет, прошедшие с момента открытия графена, всё более актуальными становятся задачи по изучению влияния дефектов и примесей на электронные свойства материалов на базе графена, а также поиск способов улучшения качеств проводимости за счёт управления величиной запрещенной зоны в графеновых нанолентах.

В диссертации представлены физические результаты, полученные методами численного моделирования, в том числе, разрабатываемыми в рамках настоящей работы. Несмотря на большое число исследований по изучению электропроводящих свойств структур углеродных нанотрубок и графеновых нанолент, автору удалось найти свой круг задач и получить интересные результаты как в области физической электроники, так и в области создания специальных вычислительных схем, программных комплексов и методов решения задач, характерных для данной предметной области. Таким образом, можно полагать, что представленная диссертация содержит решение новых задач, связанных с изучением электронного транспорта в твердотельных углеродных наноструктурах, и расширяет множество вычислительных методов, которые можно применять в физической электронике, что обуславливает несомненную **актуальность** темы представленной диссертационной работы.

По задачам, результатам, используемому аппарату, теоретическим оценкам и выводам исследуемая в диссертации область относится как к физической электронике (к п.п. 2 и 4 паспорта специальности 01.04.04, включающих: твердотельную, в том числе полупроводниковую электронику, а также физические явления в твердотельных микро- и

наноструктурах, молекулярных структурах и кластерах; проводящих, полупроводниковых и тонких диэлектрических пленках и покрытиях, причем в области физико-математических наук ученые степени присваиваются за результаты исследования общефизического характера в физической электронике), так и к специальности 05.13.18 - Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ. Содержанием этой специальности является разработка фундаментальных основ и применение математического моделирования, численных методов и комплексов программ для решения научных и технических, фундаментальных и прикладных проблем. Содержание работы относится к п.п. 3, 4 и 5 паспорта специальности: разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий, реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента и комплексные исследования научных и технических, фундаментальных и прикладных проблем с применением современной технологии математического моделирования и вычислительного эксперимента. Таким образом, **работа соответствует заявленным специальностям.**

Целью диссертационного исследования является выявление закономерностей протекания электрического тока в оксидированных графеновых нанолентах типа «зигзаг» и разветвленных твердотельных структурах из одностенных углеродных нанотрубок типа «кресло», а также разработка программного комплекса для моделирования электронного транспорта в наноструктурах данного типа.

Для достижения поставленной цели в диссертации были решены следующие задачи:

1. Разработка вычислительной методики моделирования электронного транспорта протяженных нерегулярных наноструктур и программного инструментария для исследования их атомного строения, электронной структуры и электрофизических параметров.
2. Выявление закономерностей протекания тока в разветвленных твердотельных наноструктурах из одностенных углеродных нанотрубок типа «кресло».
3. Установление влияния оксидирования на электропроводность графеновых нанолент типа «зигзаг».

В диссертационной работе Савостьянову Г.В. удалось получить ряд новых научных результатов. К наиболее значимым и интересным результатам можно отнести следующие:

- Шовные T-образные соединения между одностенными углеродными нанотрубками типа «кресло» в структуре разветвленной сети из углеродных нанотрубок при нормальных условиях обеспечивают величины удельной электропроводности,

отличающиеся не более чем на порядок от соответствующих величин при использовании бесшовных Т-образных соединений, что имеет большое практическое значение, поскольку обуславливает качество электропроводности сварных конструкций углеродных нанотрубок, сравнимое с бесшовными соединениями.

- Удельная электропроводность разветвленных твердотельных структур из одностенных углеродных нанотрубок независимо от типа соединений увеличивается более чем в три раза по мере увеличения упорядоченности нанотрубок. При этом в интервале плотностей структур от 6 до 60 кг/м<sup>3</sup> зависимость электропроводности от плотности близка к линейной при фиксированной величине упорядоченности нанотрубок.
- Осаждение в линию конечного числа атомов кислорода вдоль графеновой наноленты типа «зигзаг» приводит к появлению серии участков нулевой локальной плотности электронных состояний, ширина которых увеличивается при уменьшении расстояния между атомами кислорода, причём по мере увеличения ширины окисированных графеновых нанолент краевые электронные состояния оказывают меньшее влияние на электронный транспорт и сильнее блокируются с ростом концентрации кислорода.
- Новая вычислительная схема моделирования электронного транспорта в рамках метода неравновесных функций Грина-Келдыша в протяженных твердотельных наноструктурах с неоднородностями и разветвлениями, разработанная автором диссертации. Данная схема отличается от известных аналогов возможностью учета энергии самосогласованного заряда при использовании метода Эвальда и теории функционала электронной плотности в приближении сильной связи.
- Автоматизированная система компьютерного и имитационного моделирования для комплексного исследования электрофизических характеристик твердотельных углеродных наноструктур, молекулярных структур и кластеров, разработанная, внедренная и апробированная автором в процессе диссертационного исследования. Предложенная система включает в себя многофункциональный графический модуль и набор модулей, реализующих эффективные численные методы и алгоритмы, а также реализацию параллельных алгоритмов для осуществления высокопроизводительных вычислений, предназначенных для исследования электронного транспорта, электронной структуры, атомной структуры и динамики на базе методов неравновесных функций Грина-Келдыша, теории функционала электронной плотности в приближении сильной связи и молекулярной динамики.

Успешное решение поставленных задач демонстрируют несомненную научную квалификацию автора.

Результаты работы имеют также и **практическую ценность**:

- В ходе исследования было обнаружено, что для обеспечения высокой удельной электропроводности разветвленных твердотельных структур из одностенных углеродных нанотрубок величины контактного сопротивления шовных Т-образных соединений демонстрируют достаточно низкий порядок значений. Из этого следует, что в соответствующих практических приложениях можно ограничиться получением шовных соединений между нанотрубками, создаваемых при менее сложных технологических условиях, чем бесшовные соединения.
- Наличие участков нулевой локальной электронной плотности вблизи энергии Ферми в оксидированных графеновых нанолентах типа «зигзаг» может быть использовано для реализации ключевого режима работы нанотранзисторов.
- Разработанные программные комплексы могут быть применены как для изучения и оптимизации электрофизических характеристик твердотельных наноструктурированных материалов, так и для изучения электронной и атомной структуры и моделирования молекулярной динамики в сложных молекулярных структурах, кластерах и системах.

**Достоверность** полученных результатов обеспечивается: корректностью используемых математических методов; детальным анализом общих физических принципов, на которых основаны используемые модели; согласованностью полученных при расчетах энергетических и электрофизических характеристик рассматриваемых объектов с опубликованными теоретическими и экспериментальными результатами.

По содержанию и оформлению диссертационной работы имеются следующие **замечания**:

1. Из текста диссертационной работы неясно, почему исследование закономерностей протекания электрического тока проводится в разветвлённых структурах углеродных нанотрубок, относящихся только к типу «кресло» и в графеновых нанолентах, относящихся только к типу «зигзаг». Какие – либо указания на то, с чем связан выбор именно этих структурных типов, и почему не рассматривались другие типы хиральности исследуемых объектов, в работе отсутствуют.
2. При изложении метода пространственной декомпозиции, используемого автором в качестве основного в ходе анализа молекулярной динамики и вычисления энергии взаимодействия между атомами системы (глава 2, подраздел 2.1.1, стр.66), не указано, каким образом выбирается размер ячейки разбиения счетной области, от чего зависит

радиус отсечки  $r_{cutoff}$  и с какими физическими параметрами системы он связан, не описана методика задания координат атомов.

3. В описании метода моделирования SCC-DFTB (глава 2, подраздел 2.2.1, стр.71) отсутствует указание, откуда следует выражение для полной энергии многоатомной системы в рамках данного метода и в чем состоит метод Бройдена, применяемый автором при программной реализации SCC-DFTB.
4. В главе 2 при анализе производительности вычислений (раздел 2.8, стр.97) отмечено, что «в параллельном алгоритме молекулярной динамики <...> после каждого шага необходимо осуществить синхронизацию значений координат <...> В соответствии с законом Амдала это приводит к меньшей эффективности параллельного алгоритма». Однако, на рис.2.10, являющемся иллюстрацией этого тезиса, продемонстрирована практически линейная зависимость ускорения работы программы от количества вычислительных узлов (на рисунке этот параметр почему-то назван «количество ядер»), в связи с чем данную зависимость нужно было исследовать для большего числа узлов, чтобы показать конкретные условия снижения эффективности алгоритма.
5. В главе 3 в формулах (3.1) и (3.2) для величин сопротивления T-образного соединения углеродных нанотрубок не пояснены параметры  $G_{13}$ ,  $G_{23}$ ,  $G_{12}$  (стр.112), также не пояснен физический смысл и единицы измерения величины «упорядоченность совокупности нанотрубок», определяемой в подразделе 3.4.2 (стр.120).
6. При исследовании электропроводности древообразной структуры одностенных углеродных нанотрубок (глава 3) отсутствует сравнение результатов, полученных в результате математического моделирования, с экспериментальными данными.

Указанные недостатки не являются принципиальными и не снижают положительного впечатления о диссертации, которая свидетельствует о высокой квалификации автора как в области физической электроники, так и математического моделирования.

Результаты диссертационной работы доложены на международных и всероссийских конференциях и достаточно полно отражены в печати (по теме диссертационной работы опубликовано 25 печатных работ, 13 из которых – в журналах, рекомендованных ВАК РФ и международных периодических изданиях). На разработанные программные пакеты было получено 3 свидетельства о государственной регистрации программы для ЭВМ.

Текст диссертации имеет чёткую и ясную структуру, изложение является логичным и последовательным. Выводы автора подкрепляются ссылками на отечественные и зарубежные научные публикации. В диссертационной работе получен ряд новых результатов, имеющих важное фундаментальное и прикладное значение. Следует

отдельно отметить, что в рамках работы были реализованы программные комплексы, имеющие широкую сферу применения в области моделирования молекулярных систем и наноструктур. Автореферат диссертации полностью соответствует её содержанию.

Диссертационная работа Савостьянова Георгия Васильевича «Закономерности протекания электрического тока в оксидированных графеновых нанолентах типа «зигзаг» и разветвленных структурах на основе нанотрубок типа «кресло»» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, выполненную на высоком научном уровне и обладающую внутренним единством. В работе содержится решение актуальных задач как физической электроники, так и математического моделирования, поскольку средствами современных технологий математического моделирования и численного эксперимента в рамках реализованных автором программных пакетов были исследованы физические явления в твердотельных углеродных наноструктурах.

Диссертация соответствует специальностям 01.04.04 «Физическая электроника» и 05.13.18 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» и критериям, установленным в пп. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней». Автор диссертации, Савостьянов Георгий Васильевич, 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, Пластун Инна Львовна, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Профессор кафедры «Информационная  
безопасность автоматизированных систем»  
ФГБОУ ВПО «Саратовский государственный  
технический университет имени Гагарина Ю.А.»,  
доктор физико-математических наук

Пластун Инна Львовна

18 сентября 2018 г.

410054, г. Саратов, ул. Политехническая, 77.  
ФГБОУ ВПО «Саратовский государственный технический университет  
имени Гагарина Ю.А.», кафедра «Информационная безопасность  
автоматизированных систем»  
тел.:(845-2) 99 88 04; e-mail: inna\_pls@mail.ru

Подпись И.Л. Пластун заверяю  
Ученый секретарь СГТУ,  
кандидат физико-математических наук



Салтыкова Ольга Александровна