

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».

Диссертационная работа Савостьянова Г.В. посвящена математическому моделированию электронной проводимости в таких углеродных наноструктурах, как графеновые наноленты и углеродные нанотрубки. Оба выбранных объекта исследования представляют несомненный интерес для физической электроники, как с научной, так и с технологической точки зрения. Судя по автореферату выбор данных объектов исследования связан с одной стороны с их перспективами в ряде прикладных сфер от сенсорики до эмиссионной электроники, с другой стороны - с принципиальной возможностью их полноатомного моделирования с учётом неоднородностей при использовании определённых упрощений. В работе решаются актуальные задачи по исследованию влияния окислирования на проводимость графеновых нанолент типа «зигзаг» и влиянию структуры соединений между нанотрубками на электропроводность разветвленных структур на основе нанотрубок типа «кресло», а также развитию и разработке соответствующих математических моделей, методов и комплексов программ. Тема диссертации соответствует специальностям 01.04.04 - «Физическая электроника» и 05.13.18 - «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Научная новизна работы, в частности, заключается в следующем:

- показано, что величина контактного сопротивления Т-образных соединений между ОУНТ типа «кресло» диаметром 1.5 нм принимает значения в диапазоне от 20 до 100 кОм, что более чем на порядок ниже величины контактного сопротивления между ОУНТ, связанными силами Ван-дер-Ваальса;
- показано, что упорядоченное осаждение конечного числа атомов кислорода вдоль графеновой наноленты приводит к появлению серии участков нулевой локальной электронной плотности;
- предложена новая вычислительная схема для исследования электронной проводимости в протяжённых наноструктурах с неоднородностями и разветвлениями, основанная на оригинальной комбинации метода неравновесных функций Грина-Келдыша;
- создан новый комплекс программ для исследования атомного строения и электрофизических характеристик твердотельных углеродных наноструктур, молекулярных структур и кластеров.

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.

Практическая значимость результатов данной работы связана с возможностью использования разработанного программного комплекса как для исследования электронной проводимости протяжённых наноструктур, содержащих неоднородности и разветвления, так и в учебном процессе. Практический интерес представляет принципиальная возможность получения локального участка протяжённой наноструктуры, расположение участков нулевой локальной плотности которой

управляется конечным числом регулярных структурных модификаций, что в работе было продемонстрировано на примере регулярного осаждения атомов кислорода вдоль графеновой наленты.

Замечания по автореферату:

- Из текста автореферата не ясно, насколько большие протяжённые наноструктуры могут быть исследованы в рамках предложенной вычислительной схемы, каков критический размер одного сегмента протяжённой наноструктуры, какое количество различных сегментов может быть включено в модель и т. д.
- Автору следовало рассмотреть, насколько устойчив обнаруженный эффект появления участков нулевой локальной электронной плотности, к влиянию температурных флуктуаций, приводящих к нарушению идеальной идентичности сегментов модели между собой и т. п.

Данные замечания не снижают общего положительного впечатления о работе.

Содержание автореферата позволяет сделать вывод, что диссертация представляет собой целостную работу, выполненную на хорошем уровне. 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, Попов Игорь Юрьевич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Попов Игорь Юрьевич,
доктор физико-математических наук, профессор,
ведущий профессор,
Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего
образования «Санкт-Петербургский национальный
исследовательский университет информационных
технологий, механики и оптики»,
197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49
Рабочий телефон 7-812-3126131
E-mail iyporov@corp.ifmo.ru

