

«Утверждаю»

Директор Федерального
государственного бюджетного учреждения науки

Институт проблем сверхпластичности
металлов Российской академии наук

д.т.н Имаев Р.М.

2022 г.



ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук на диссертационную работу **Баркова Павла Валерьевича** «Закономерности распределения заряда и электронного транспорта в тонких пленках наносетчатого графена, в том числе модифицированного карбоксильными группами», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5. – Физическая электроника.

Диссертационная работа Баркова П.В. направлена на выявление новых физических закономерностей электронных и электропроводных свойств тонких пленок наносетчатого графена (НСГ) с круглыми отверстиями диаметром ~ 1.2 нм в отсутствие модификаций и при модификации поверхности пленок атомами водорода и карбоксильными группами с позиции использования таких наноструктур в устройствах микро- и нанoeлектроники, в том числе сенсорах. Основной акцент в работе сделан на изучении физических явлений транспорта электронов и перераспределения плотности электронного заряда в немодифицированных и модифицированных пленках НСГ. Для достижения поставленной цели и задач исследования автором грамотно и эффективно используются высокоточные квантовые методы компьютерного моделирования наноструктур, а именно метод функционала электронной плотности в приближении сильной связи с самосогласованным вычислением заряда (SCC-DFTB), теория квантового транспорта в формализме Ландауэра-Буттикера и метод неравновесных функций Грина-Келдыша. В рамках проведенных исследований полученные результаты обладают достаточной степенью научной новизны и значимостью и полностью соответствуют специальности 1.3.5. – Физическая электроника.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы, включающего 99 наименований. Полученные результаты наглядно проиллюстрированы, излагаются логично и последовательно. Диссертационная работа и автореферат оформлены в соответствии с действующими требованиями.

Во **введении** автором обосновывается актуальность выбранной темы исследования, определены цель и задачи диссертационной работы, аргументирована ее научная новизна, описана научная и практическая значимость полученных результатов, их достоверность, сформулированы положения, выносимые на защиту, приведены сведения об апробации полученных результатов и публикациях по теме работы.

В первой главе диссертационной работы дается описание физико-математических основ используемых в работе методов компьютерного моделирования атомной структуры немодифицированных и модифицированных пленок НСГ и прогнозирования их электронных и электропроводных свойств. Приводится обоснование выбора используемых методов расчета применительно к объектам исследования и задачам диссертационной работы.

Во второй главе диссертационной работы описаны атомистические модели суперъячеек исследуемых пленок НСГ с различными метрическими характеристиками (шириной шейки вдоль направления «зигзаг» и вдоль направления «кресло» листа графена) и проведен анализ полученных результатов расчета энергетических и электропроводных параметров этих суперъячеек.

В третьей главе диссертационной работы представлены результаты исследования влияния модификации краевых атомов отверстий пленок НСГ атомами водорода (Н-модификации) на их электронную структуру и электропроводные свойства.

В четвертой главе диссертационной работы представлены результаты выявленных закономерностей электронного транспорта и перераспределения электронной плотности заряда в пленках НСГ, модифицированного карбоксильными (СООН) группами, при взаимодействии его поверхности с молекулами воды и аммиака. Описана оригинальная методика проведения *in silico* модификации НСГ функциональными группами, основанная на определении энергетически выгодных мест посадки для групп путем анализа распределений избыточного заряда на атомах НСГ, и прошедшая экспериментальную апробацию на примере модификации НСГ СООН-группами.

Основные результаты и выводы четко сформулированы в **заключении**. К наиболее важным и значимым научным результатам диссертационной работы можно отнести следующее:

1. Показано, что пленки НСГ с круглыми отверстиями диаметром ~ 1.2 нм в зависимости от выбора направления увеличения ширины шейки (минимальное расстояние между атомами соседних отверстий) характеризуются анизотропией электронных свойств, причиной чего является неравномерное распределение LDOS по атомам суперъчейки в независимости от направления увеличения ширины шейки.
2. Выявлен физический эффект скачкообразного изменения удельной электропроводности пленки НСГ в случае электронного транспорта и вдоль направления «зигзаг», и вдоль направления «кресло» при увеличении ширины шейки вдоль направления «зигзаг» листа графена.
3. Установлено, что энергетическая щель пленок НСГ полностью исчезает в случае Н-модификаций, когда все или большинство краевых атомов отверстия имеют sp^3 -гибридизованные электронные облака. Выявлено, что во всех рассмотренных случаях Н-модификации (как с sp^2 -, так и sp^3 -гибридизацией электронных облаков краевых атомов отверстия) наблюдается анизотропия электропроводных свойств пленок НСГ в зависимости от направления электронного транспорта: вдоль направления «кресло» листа графена величина электропроводности намного выше, чем вдоль направления «зигзаг». В случае полного насыщения связей краевых атомов отверстия пленки НСГ нулевая электропроводность наблюдается на большом интервале энергий в случае электронного транспорта вдоль направления «зигзаг», в то время как вдоль направления «кресло» электропроводность достигает своего максимума для данной структуры.
4. Выявлено, что комбинация молекул аммиака и воды на поверхности пленки НСГ с круглыми отверстиями диаметром ~ 1.2 нм, модифицированного COOH-группами, приводит к почти двукратному увеличению сопротивления по сравнению со значением сопротивления модифицированной графеновой структуры в отсутствие воды и аммиака.

При обсуждении диссертационной работы Баркова П.В. были сформулированы следующие **замечания**:

1) Пункт 4, положений, выносимых на защиту: не является ли смещение уровня Ферми для системы графен/вода/аммиак предсказуемым результатом? Не думаете ли вы, что подобный вывод можно было сделать, не проводя моделирование?

2) Возможно ли уменьшить либо увеличить диаметр отверстия? Как изменится в этом случае результат?

3) Почему выбрано название наносетчатый графен? Не является ли эта структура ближе к перфорированному графену?

4) Будет ли узор атомов по краям отверстия для модифицированного НСГ таким же как в эксперименте или это некоторое случайное распределение групп-модификаторов?

Отмеченные замечания не снижают общей положительной оценки диссертационной работы П.В. Баркова. Диссертация является цельной, логической стройной в рамках рассмотренной проблемы работой, посвящённой актуальной теме. Несомненный научный интерес представляют найденные в работе способы топологического управления энергетическими параметрами и электропроводностью пленок немодифицированного НСГ с позиции точечной настройки физических свойств таких пленок в зависимости от их назначения. Выявленные конфигурации пленок НСГ, модифицированного атомами водорода и карбоксильными группами, представляют практический интерес в качестве перспективного материала для электронных устройств с эффектом переключения тока и чувствительного элемента газовых сенсоров. Результаты диссертации найдут свое применение в научно-исследовательских организациях (Институт радиотехники и электроники РАН и его филиалы, Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН (г. Москва), Институт проблем сверхпластичности металлов РАН (г. Уфа), Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН (г. Томск), Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН (г. Санкт-Петербург), Объединённый институт ядерных исследований (г. Дубна), Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН (г. Москва)) при проведении исследований фундаментального и прикладного характера в области электроники низкоразмерных структур, а также в высших учебных заведениях при разработке ряда учебных дисциплин для студентов физико-математического профиля подготовки (МГУ имени М.В. Ломоносова, Национальный исследовательский университет "МИЭТ", Башкирский государственный университет, Казанский федеральный университет, Волгоградский государственный технический университет, Волгоградский государственный университет, Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю. А. и др.).

По теме диссертации опубликовано 12 печатных работ, из них 7 работ в изданиях из перечня ВАК при Минобрнауки России, включая 6 работ в журналах, входящих в международные информационно-аналитические базы данных и системы научного цитирования Web of Science и/или Scopus, 5 – в трудах и сборниках всероссийских и международных конференций. Результаты работы докладывались и обсуждались на международных и всероссийских научных конференциях. Публикации по теме диссертации в полной мере отражают основные результаты диссертационной работы. Автореферат полностью соответствует задачам и результатам диссертационной работы.

Можно заключить, что диссертация Баркова П.В. по актуальности решенных задач, объему проведенных исследований, степени научной новизны и практической значимости результатов полностью соответствует специальности 1.3.5. – Физическая электроника и удовлетворяет всем требованиям пп. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней» утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 года, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а её автор, Барков Павел Валерьевич, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5. – Физическая электроника.

Отзыв составлен и утвержден на заседании семинара Института проблем сверхпластичности металлов РАН (протокол № 8 от 14 октября 2022 года).

Заведующая лабораторией

«Физика и механика углеродных наноматериалов»

Института проблем сверхпластичности металлов РАН

профессор РАН,

доктор физико-математических наук

« 15 » 10 2022 г.

Баимова Юлия Айдаровна

Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук защищена по специальности 1.3.8 (01.04.07) – Физика конденсированного состояния.

Рабочий адрес организации:

Федеральное государственное учреждение науки Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук (ИПСМ РАН)

Почтовый адрес: 450001, Республика Башкортостан, г. Уфа, ул. Степана Халтурина, д. 39

Телефон/факс: +7 (347) 223 - 64 - 07 / +7 (347) 282 - 37 - 59

Адрес электронной почты: imsp@imsp.ru

Подписи и контактную информацию Баимовой Ю.А. удостоверяю.

Начальник отдела кадров ИПСМ РАН



Т.П. Соседкина