

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Баркова Павла Валерьевича «Закономерности распределения заряда и электронного транспорта в тонких пленках наносетчатого графена, в том числе модифицированного карбоксильными группами», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5 – Физическая электроника.

Диссертационная работа П.В. Баркова посвящена моделированию переноса заряда в новом материале – наносетчатом графене. Новизна работы обусловлена тем, что проводимость и электронное строение этого материала существенно отличаются от свойств известных углеродных наноструктур – графена и графеновых нанополос. Автором показано, что в зависимости от топологических свойств ширина запрещенной зоны наносетчатого графена меняется в широких пределах, что может использоваться для конструирования на основе этого материала сложных наноустройств с задуманной формой валентной зоны и зоны проводимости.

Применяемые модели и расчетные схемы представляются надёжными и обеспечивают достоверность получаемых результатов. Наряду с общепринятыми подходами, автор использовал недавно разработанный алгоритм Mizar, позволивший ускорить вычисления и рассмотреть системы большого размера. По итогам работы опубликовано 7 статей в рецензируемых, в том числе в престижных журналах *Advanced Materials Technologies* и *Nanomaterials*.

К автореферату имеется несколько замечаний:

1) Предложенный автором способ размещения карбоксильных групп на краях отверстий в графене требует дополнительной проверки. Частичный заряд атома не является достаточным критерием для определения его способности адсорбировать карбоксильную группу. Большую роль могут иметь локальные деформации углеродного скелета, которые получают возможность релаксировать при присоединении функциональной группы, а также водородные связи между группами. Наш опыт функционализации фуллеренов разными группами (H, OH, F, COOH) показал недостаточность критериев, основанных на заряде атомов или функциях Фукуи (см., например, М. Салем и др., *Physica E* 2020, doi:10.1016/j.physe.2020.114319; Е. Калика и др., *J. Mol. Liquids* 2022, doi: 10.1016/j.molliq.2022.118773).

Учитывая относительно небольшое число узлов, пригодных для адсорбции, а также симметрию отверстия, можно было бы непосредственно убедиться, что способы расположения двух, трёх и возможно большего числа карбоксильных групп, предсказываемые разработанным алгоритмом, действительно обеспечивают более низкую энергию по сравнению с другими расположениями.

2) Автор рассматривает взаимодействие воды и аммиака с наносетчатым графеном. Если вода действительно является очень распространенным соединением, то рассмотрение

аммиака требует дополнительного пояснения. Неясно, почему вместо аммиака не рассматривались менее экзотические атмосферные газы – азот, кислород, углекислый газ.

Незначительные замечания:

3) Словосочетание «модификация краевых атомов» мало распространено – чаще используются термины «допирование», «функционализация», «пассивация».

4) В списке опубликованных по теме диссертации статей неверно указан порядок авторов. Например, авторы первой статьи – «*Rabchinskii, Sysoev, Glukhova, ...*», а в автореферате указано «*Barkov, Glukhova, Rabchinskii, ...*». Аналогичные неточности допущены и в других ссылках.

Несмотря на указанные замечания, исследование оставляет положительное впечатление и заслуживает самой высокой оценки. Судя по представленному автореферату, диссертационная работа удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям в соответствии с Положением о присуждении ученых степеней, а ее автор, Барков Павел Валерьевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5 – Физическая электроника.

Доктор физико-математических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия, профессор отделения нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике офиса образовательных программ Института нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»



/ Катин Константин Петрович

Адрес: 115409, Москва, Каширское шоссе, 31

E-mail: KPKatin@mephi.ru; +7(906)066-92-48

Подпись

ЗАВЕРЯЮ

Начальник отдела по
работе с научно-педаго-
гическими работниками *

Е. Ф. Хождова

28.10.2022

