

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

Завьялова Дмитрия Викторовича

на диссертационную работу Колосова Дмитрия Андреевича

«Закономерности электронного транспорта и перетекания заряда в тонких плёнках на основе графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками при модификации нанополостей плёнок молекулярными кластерами бора и кремния», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

по специальности **1.3.5. – Физическая электроника.**

Актуальность темы диссертационной работы

Несмотря на то, что углеродные нанотрубки были открыты еще в конце XX века, а графен был впервые изготовлен в начале XXI века интерес к ним не ослабевает до сих пор по нескольким причинам. В качестве одной из них уверенно можно назвать огромное разнообразие композитов, которые можно построить на их основе, с подчас совершенно различными физическими свойствами. Это разнообразие умножается различными примесями как в виде одиночных атомов, так и их кластеров, которые также сильно влияют на свойства этих структур. И среди всего этого разнообразия возможных сочетаний геометрий композитов и их примесей находятся варианты с практически важными наборами свойств. Так, уже есть публикации, в которых обсуждается возможность применения структур на основе углеродных нанотрубок и графеновых наносеток в качестве дисплеев высокого разрешения, автоэмиссионных катодов, газовых сенсоров, ионисторов и транзисторов. Все вышесказанное обуславливает безусловную актуальность темы диссертационной работы.

Цель работы

Целью работы было выявление физических закономерностей электронных и электрофизических свойств композитов графен/одностенные углеродные нанотрубки, чистых и модифицированных кремнием и бором, для повышения эффективности их применения в качестве материала для электродов портативных устройств.

Задачи исследования

Для достижения поставленной цели в диссертации были решены следующие задачи:

- 1) Выявление энергетически стабильных супер-ячеек композитных тонких плёнок графен/одностенные углеродные нанотрубки с вертикально ориентированными нанотрубками закрытыми/открытыми концами и определение закономерностей их электронного строения и электрофизических характеристик.

- 2) Поиск оптимальных с точки зрения применения в качестве материала для электродов портативных источников электрической энергии модификаций композитов графен/одностенные углеродные нанотрубки кластерами атомов кремния.
- 3) Поиск оптимальных с точки зрения применения в качестве материала для ионисторов модификаций композитов графен/одностенные углеродные нанотрубки кластерами атомов бора.

Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения и списка литературы (146 наименований). Диссертация изложена на 128 страницах, содержит 11 таблиц и 31 рисунок.

Научная новизна и практическая значимость

В диссертации впервые:

- 1) Выявлены геометрический параметры исследуемых композитов для обеспечения их энергетической стабильности;
- 2) Показано, что заполнение пространства между соседними вертикально ориентированными нанотрубками кластерами кремния Si_{16} , атомами лития и натрия является энергетически выгодным процессом;
- 3) Выявлен эффект значительного (на два порядка) снижения электрического сопротивления композита графен/одностенные углеродные нанотрубки при добавлении кластеров кремния Si_{16} ;
- 4) Установлена массовая доля добавленного к исследуемым композитам кремния, обеспечивающая максимальную удельную емкость этих систем;
- 5) Показано, что кластеры бора B_{12} в значительной степени увеличивают квантовую емкость композитных плёнок графен/одностенные углеродные нанотрубки с нанотрубкой (6,6) типа «кресло».

Кроме этого в диссертации разработана и программно реализована оригинальная методика заполнения нанополостей графен/одностенные углеродные нанотрубки.

Выявленные физические закономерности протекания тока и перетекания заряда в тонких композитных плёнках графен/одностенные углеродные нанотрубки, модифицированных кластерами кремния Si_{16} и бора B_{12} , представляют большой интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. С фундаментальной точки зрения интерес определяется реализацией возможности топологического управления электронным строением подобных композитных плёнок, варьируя типом и массовой долей модифицирующих кластеров. Практический интерес обусловлен открывающимися перспективами использования композитных плёнок графен/одностенные углеродные нанотрубки, модифицированных кластерами кремния и бора, в качестве электропроводящего каркаса для изготовления электродов портативных источников энергии, суперконденсаторов, сенсоров, наноэмиттеров.

Новизна результатов проведённых в рамках диссертационной работы исследований подтверждается научными публикациями, что соответствует рекомендациям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842.

Обоснованность и достоверность защищаемых научных положений и выводов

Положения, выносимые на защиту в диссертации, хорошо обоснованы. Их достоверность подтверждается использованием таких широко известных, часто применяемых в аналогичных задачах и хорошо себя зарекомендовавших методов вычислительной физики как теория функционала плотности, методы квантовой и классической молекулярной динамики. Отмечу, что в диссертации использованы конкретные реализации этих методов, входящие в состав широко известных, регулярно обновляемых и поддерживаемых программных пакетов (таких как SIESTA, LAMMPS и др.), что добавляет уверенности в достоверности представленных расчетов.

Замечания по диссертационной работе

1. На мой взгляд, кроме текстового описания алгоритма заполнения нанополостей исследуемых структур следовало привести еще текст написанной программы.

2. Во второй главе из описания вычислительных экспериментов по заполнению нанополостей атомами лития методом классической молекулярной динамики неясен протокол термализации исследуемых систем.

3. В третьей главе при описании вычислительных экспериментов по исследованию влияния кластеров бора на емкость композитных пленок графен/однослойные углеродные нанотрубки неясно построены ли исследуемые характеристики для одного распределения кластеров по нанотрубкам или все-таки делалась серия опытов для каждого числа кластеров с разным их распределением и результаты усреднялись.

4. Не указан метод определения частичных зарядов при исследовании перетекания зарядов с атомных кластеров на композитные пленки.

Однако отмеченные недостатки не снижают общего хорошего впечатления от работы и не отменяют полученных результатов.

Общая оценка диссертационной работы.

Диссертационная работа Колосова Д.А. содержит решение актуальной задачи физической электроники, заключающейся в определении геометрических и электрофизических параметров композитных пленок графен/однослойные углеродные нанотрубки (как чистых, так и легированных кластерами бора и кремния) с целью повышения эффективности их применения в качестве материала

для электродов источников энергии, суперконденсаторов, сенсоров, наноэмиттеров и других портативных устройств.

Результаты диссертационной работы опубликованы в 9 печатных работ, из них 5 работ в изданиях, индексируемых международными информационно-аналитическими базами данных и системами научного цитирования Web of Science и/или Scopus, 1 работа – в издании из перечня ВАК при Минобрнауки России, 3 – в трудах и сборниках всероссийских и международных конференций.

С учетом вышесказанного считаю, что диссертационная работа «Закономерности электронного транспорта и перетекания заряда в тонких плёнках на основе графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками при модификации нанополостей плёнок молекулярными кластерами бора и кремния» соответствует всем требованиям пп. 9-11,13,14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а её автор, Колосов Дмитрий Андреевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5. – Физическая электроника.

Заведующий кафедрой «Физика» факультета электроники и вычислительной техники Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Волгоградский государственный технический университет» (ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет»), доцент, д.ф.-м.н. (01.04.04 – Физическая электроника)

Адрес: 400005, г. Волгоград, пр. им. Ленина, 28, Телефон: 8(8442)248107,

E-mail: physics@vstu.ru


Завьялов Дмитрий Викторович

Подпись д.ф.-м.н. Завьялова Дмитрия Викторовича удостоверяю:

9 ноября 2021 г.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Волгоградский государственный технический университет» (ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет»)

Адрес: 400005, г. Волгоград, пр. им. Ленина, 28

Телефон: +7 (8442) 24-81-15

E-mail: rector@vstu.ru

