

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

Завьялова Дмитрия Викторовича

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 ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5. – Физическая электроника.

Актуальность темы диссертационной работы.

Диссертационная работа Баркова П.В. посвящена изучению особенностей квантового транспорта электронов и распределения заряда в тонких пленках наносетчатого графена, как в отсутствие модификаций его поверхности, так и при наличии атомов водорода и карбоксильных групп. Наносетчатый графен относится к числу наиболее перспективных современных углеродных наноматериалов, представляющих интерес, как для проведения фундаментальных исследований их свойств, так и для прикладных разработок на их основе, в частности в низкоразмерной электронике. Неоспоримым преимуществом наносетчатого графена по сравнению с обычным графеном является наличие у него запрещенной зоны, что открывает широкие возможности для его использования в полупроводниковых радиоэлектронных компонентах, в частности полевых транзисторах. Важным этапом создания электронных устройств на основе новых материалов является предварительное исследование их свойств с целью поиска способов их настройки. Эффективным инструментом для проведения подобных исследований являются методы компьютерного моделирования, позволяющие рассмотреть десятки и даже сотни возможных вариантов изменения одного свойства или целой группы свойств наноматериалов за счет внесения модификаций в их атомное строение. В связи с этим, тема диссертационной работы Баркова Павла Валерьевича является актуальной.

Цель работы

Целью диссертационной работы было выявление физических закономерностей электронного транспорта и перераспределения плотности электронного заряда в тонких пленках наносетчатого графена с круглыми отверстиями диаметром ~ 1.2 нм, чистых и модифицированных атомами водорода и карбоксильными группами, с позиции применения таких пленок в устройствах микро- и нанoeлектроники, в том числе в сенсорах.

Задачи исследования

Для достижения поставленной цели в диссертации были решены следующие научные задачи:

- 1) Поиск оптимального с позиции применения в качестве электропроводящего канала в устройствах нанoeлектроники способа топологического управления энергетическими параметрами и электропроводностью немодифицированного наносетчатого графена;
- 2) Выявление закономерностей влияния модификаций краевых атомов отверстий наносетчатого графена атомами водорода и карбоксильными группами на его электронную структуру и электропроводные свойства;

- 3) Установление закономерностей физических явлений транспорта электронов и перераспределения плотности электронного заряда в тонких пленках модифицированного карбоксильными группами наносетчатого графена при взаимодействии его поверхности с молекулами воды и аммиака с позиции наиболее эффективного применения этих пленок в качестве чувствительного элемента сенсорных устройств.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы, содержащего 99 наименований. Диссертация изложена на 138 страницах, содержит 10 таблиц и 51 рисунок.

Научная новизна полученных результатов

Полученные в диссертационной работе результаты обладают научной новизной. Наиболее приоритетными из них являются следующие:

1. Выявлен осциллирующий характер изменения энергетической щели тонких пленок наносетчатого графена с круглыми нанометровыми отверстиями в диапазоне от 0.03 до 0.37 эВ при последовательном увеличении ширины шейки (минимального расстояния между атомами соседних отверстий) в направлении «зигзаг» листа графена в диапазоне 0.74 – 5.18 нм. Наибольшие значения энергетической щели наблюдаются при шаге изменения ширины шейки, кратном трем.
2. Установлена анизотропия электропроводности тонких пленок наносетчатого графена с круглыми нанометровыми отверстиями с увеличивающейся шириной шейки в разных направлениях транспорта электронов (вдоль направления «зигзаг» или вдоль направления «кресло» листа графена), вызванная неравномерным распределением локальной плотности электронных состояний (LDOS) по атомам суперъячейки в обоих направлениях увеличения ширины шейки (вдоль направления «зигзаг» и вдоль направления «кресло» листа графена).
3. Показано, что полное насыщение связей краевых атомов отверстий (случай sp^3 -гибридизации электронных облаков) позволяет «включать» транспорт электронов в одном направлении (вдоль направления «кресло» листа графена) и полностью «выключать» в другом направлении (вдоль направления «зигзаг» листа графена) токопереноса.
4. Разработана оригинальная методика *in silico* модификации краевых атомов отверстия наносетчатого графена карбоксильными группами, обеспечивающая удовлетворительное соответствие рассчитанных энергетических (энергетическая щель, энергия Ферми) и электропроводных (электрическое сопротивление) параметров экспериментально устанавливаемым.
5. Показано, что посадка на поверхность пленки модифицированного карбоксильными группами наносетчатого графена комбинации молекул воды и аммиака приводит к почти двукратному увеличению ее электрического сопротивления.

Обоснованность и достоверность защищаемых научных положений и выводов

Защищаемые научные положения и выводы, сформулированные в диссертации, являются обоснованными. Их достоверность подтверждается применением для расчетов рассматриваемых в работе атомных конфигураций пленок наносетчатого графена методов математического моделирования, имеющих параметризацию для воспроизведения данных натурального эксперимента по геометрическим и энергетическим параметрам углеродных и углеводородных соединений, качественным и количественным совпадением результатов расчета электрических сопротивлений, энергии Ферми и энергетической щели пленок наносетчатого графена, модифицированного карбоксильными группами, а также широкой апробацией результатов работы на международных и всероссийских конференциях.

Замечания по диссертационной работе

1. В работе для исследования энергетических параметров рассматриваемых структур используются некоторые вычислительные методы квантовой механики (например, DFTB), но крайне мало обсуждается влияние точности вычислительного метода на полученные результаты. В частности, во второй главе для некоторых расчетов получены значения энергетической щели порядка сотых долей электронвольта, что, на мой взгляд, требует дополнительных обоснований.

2. Из текста неясно каким методом и почему именно им в разработанной в диссертации методике *in silico* модификации краевых атомов отверстия наносетчатого графена функциональными группами считался избыточный заряд, тем более что именно по значению заряда делаются ключевые для методики выводы. Тем не менее известно, что различные методики численного определения избыточного заряда могут давать разные результаты.

3. Достоверность представленных результатов была бы выше, если более полно и прозрачно были бы описаны протоколы численных экспериментов (каковы были настройки используемых программ, в какой последовательности и что сделано и т.д.).

4. Некоторые таблицы, имеющих небольшие размеры, вполне можно было не выносить на отдельные страницы.

Общая оценка диссертационной работы.

Диссертационная работа Баркова Павла Валерьевича содержит решение актуальной задачи физической электроники, заключающейся в установлении закономерностей квантового транспорта электронов и распределения заряда в тонких пленках наносетчатого графена с круглыми отверстиями нанометрового диаметра при различных модификациях атомной структуры пленок. На основе полученных в работе результатов определены оптимальные структурные конфигурации немодифицированных и модифицированных атомами водорода и карбоксильными группами пленок наносетчатого графена, перспективные в качестве электропроводящего канала полевых транзисторов и чувствительного элемента сенсоров.

Диссертационная работа имеет логически выстроенную структуру, грамотно и понятно написана, содержит достаточное для интерпретации полученных результатов число иллюстраций и таблиц. Автореферат диссертации в полной мере отражает ее содержание.

Результаты диссертационной работы опубликованы в 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.

С учетом вышесказанного считаю, что диссертационная работа «Закономерности распределения заряда и электронного транспорта в тонких пленках наносетчатого графена, в том числе модифицированного карбоксильными группами» 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, Барков Павел Валерьевич, 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) 24-80-69

E-mail: physics@vstu.ru

Завьялов Дмитрий Викторович

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

28 октября 2022 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

