

Отзыв официального оппонента на диссертацию Дмитрия Геннадьевича Квашнина «Особенности физико-химических свойств наноструктур на основе графена», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

Одной из наиболее развивающихся областей физики наноструктур и материаловедения является изучение углеродных наноструктур, в особенности графена и структур на его основе. Теоретические предсказания свойств новых наноструктур на основе графена являются крайне перспективной областью и необходимыми как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения.

На сегодняшний момент методы исследования, основанные на теории функционала электронной плотности, являются наиболее распространенным и мощным средством изучения атомной структуры и физико-химических свойств нанообъектов. Данные методы позволяют получить необходимую информацию о свойствах исследуемой системы с помощью решения уравнений квантовой механики.

Диссертация Квашнина Д.Г. представляет собой детальное исследование электронных и транспортных свойств новых наноструктур на основе графена, таких как, частично гидрированный графен, графеновые наноленты, нанохлопья и слоистые структуры на основе графена в зависимости от типов дефектов и концентрации примесных атомов с помощью теории функционала электронной плотности.

Им были получены свойства объектов – их стабильность, электронная структура и др. Исследованные объекты имеют значительные перспективы в качестве элементов наноэлектроники и являются предметом интенсивного исследования многих научных групп всего мира, поэтому работа является актуальной.

Текст диссертации изложен на 113 страницах машинописного текста, содержит 29 рисунка и список использованных литературных источников из 162 наименований. Материалы диссертации изложены в 24 печатных работах, из которых 8 статей в научных журналах и 16 тезисов конференций. Основные положения диссертации полностью представлены в опубликованных работах.

Исследование свойств материалов на основе графена является относительно молодой областью материаловедения, которая, в настоящее время находится на этапе стремительного развития. Графен и материалы на его основе являются одними из главных объектов изучения, поскольку их уникальные электронные и механические свойства позволят в перспективе использовать их в большом наборе области технологии. Именно данным структурам, а также их аналогам другого состава посвящена основная часть диссертации.

Автором было проведено изучение электронных свойств сверхрешеток на основе графена с периодическим расположением функциональных групп на поверхности. Впервые показан общий характер изменения ширины запрещенной зоны (при малых концентрациях) в зависимости от относительного расстояния между функциональными группами на поверхности.

Детально исследованы электронные свойства квантовых точек на поверхности графеновых нанолент в зависимости от размера и формы гидрированного участка. Пошагово изучен процесс их формирования посредством осаждения атомов водорода на поверхность графеновых нанолент. Показана сильная зависимость характера роста от типов краев наноленты.

Помимо электронных свойств, диссертантом также впервые были исследованы транспортные свойства графеновых нанолент в зависимости от типа структурных дефектов. В качестве дефектов были изучены моновакансии, дефект поворота связи Стоуна-Уэльса и гидрированный участок. Наличие гидрированного участка приводит к резкой блокировке носителей заряда, что свидетельствует о снижении плотности тока.

Изучение эмиссионных свойств графеновых нанолент и нанохлопьев показало, что при

наличие примесных атомов азота работа выхода с поверхности графеновых наноструктур снижается на 0.3 эВ, в то время как наличие примесей бора приводит к увеличению значения работы выхода на 0.5 эВ. Для графеновых нанохлопьев получено, что работа выхода монотонно снижается с увеличением размера хлопьев.

Также, кроме наноструктур на основе монослоя графена, диссертантом были впервые исследованы атомная структура, процесс формирования, стабильность и электронные

свойства новых двухслойных наноструктур на основе графена с периодически расположенными гексагональными дырками, полученных после формирования гексагональных отверстий в двухслойном графене. Интересным результатом является то, что после формирования отверстий происходит спонтанное соединение верхнего и нижнего слоев по границе отверстий. Данный факт также находит и экспериментальное подтверждение.

Помимо углеродных наноструктур Квашниным Д. Г. были впервые предложены ковалентные гетероструктуры, состоящие из слоя графена и слоя MoS_2 . Для корректного описания процесса взаимодействия атомов молибдена с поверхностью MoS_2 Дмитрием Квашниным были изучены возможные параметры, описывающие электронные конфигурации атома молибдена. Детально изучен процесс взаимодействия сторонних атомов с поверхностью MoS_2 . Предложен возможный способ формирования таких объектов, оценена их стабильность.

Результаты, описанные в диссертационной работе, являются новыми. Они могут найти практическое применение в исследованиях, посвященных проблемам физики нанобъектов.

Методы расчета, применяемые в работе выбраны исходя из пределов применимости каждого из них и задач каждого конкретного исследования. Достоверность теоретических результатов обеспечивается расчетом предельных случаев и их хорошим согласием с имеющимися литературными данными.

В тоже время, по диссертационной работе имеются следующие небольшие замечания:

1. В Главе 5 говорится об уменьшении работы выхода с поверхности графеновых нанолент после внедрения в их структуру примесей и пассивации краёв атомами водорода и фтора. Чем, с физической точки зрения, вызвано данное снижение? Из текста диссертации это не совсем ясно.
2. В тексте диссертации используется точка в качестве десятичного разделителя, тогда как в тексте на русском языке правильнее использовать запятую.
3. Вместо применения термина «нанолента зигзажного типа» лучше использовать «нанолента типа зиг-заг»

Тем не менее, приведенные замечания не снижают ее достоинства.

Диссертация представляет законченную научно-исследовательскую работу, выполненную на высоком научном уровне. В работе решены сложные и важные для физики научные задачи по предсказанию свойств наноструктур до получения их в эксперименте.

Автореферат и опубликованные работы в полной мере отражают основное содержание диссертации. Считаю, что рецензируемая диссертационная работа отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней ВАК России, а ее автор, Дмитрий Геннадьевич Квашин заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия (физико-математические науки).

Официальный оппонент

к. ф.- м. н., старший научный сотрудник

Центр естественно-научных исследований

отдел светоиндуцированных поверхностных явлений

лаборатории спектроскопии наноматериалов

ФГБУН Институт общей физики

им. А. М. Прохорова РАН
119991, Москва, ул. Вавилова, 38



(подпись)

/ Осадчий Александр Валентинович

(расшифровка)

Тел.: (499) 503-87-80

E-mail: aosadchy@kapella.gpi.ru

« 30 » ноября 2015 г.

