



**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт нанотехнологий микроэлектроники
Российской академии наук (ИНМЭ РАН)**

119991, г. Москва, Ленинский проспект, д. 32А,
тел. (499) 616 3812, факс (499) 616 3812
ИНН 7724595010 КПП 773601001 ОГРН 1067758649375

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИНМЭ РАН,
Академик РАН

Сауров А.Н.

2021 г.



ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

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

Диссертационная работа Колосова Д.А. направлена на выявление методами физико-математического моделирования новых физических закономерностей электронных и электрофизических свойств графен/ОУНТ (одностенные углеродные нанотрубки) композитных тонких плёнок с вертикально ориентированными нанотрубками, чистых и модифицированных кластерами кремния и бора, для повышения эффективности их применения в качестве наноматериала для электродов портативных устройств. Основное внимание в работе уделено исследованию влияния кластеров кремния и бора на электропроводность и удельную/квантовую ёмкость композитных тонких пленок графен/ОУНТ. В работе удачно сочетаются квантово-механические и молекулярно-динамические методы моделирования наноструктур, взаимодополняющие друг друга при

решении поставленных в диссертации научных задач. 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, трех глав, заключения и списка цитируемой литературы, включающего 146 наименований. Полученные результаты наглядно иллюстрируются и детально обсуждаются в работе. Диссертационная работа и автореферат оформлены в соответствии с действующими требованиями.

Во **введении** автором указаны актуальность выбранной темы исследования, сформулированы цель и задачи исследования, описаны научная новизна, достоверность и обоснованность научных результатов и выводов, их научная и практическая значимость, сформулированы положения, выносимые на защиту, приведены сведения об апробации полученных результатов и публикациях по теме работы.

В первой главе диссертации приводится описание физико-математического аппарата используемых методов моделирования физических процессов в графен/ОУНТ композитных плёнках: метода функционала плотности (DFT), используемого для нахождения равновесной конфигурации исследуемых композитных структур, формализма Ландауэра – Буттикера и аппарата функций Грина – Келдыша, применяемых для изучения квантового транспорта, квантовой молекулярной динамики Кара – Паринелло для моделирования заполнения плёнок кластерами кремния и эмпирической молекулярной динамики Lammps с применением силового поля ReaxFF для моделирования процесса заполнения плёнок атомами лития. Приводятся особенности реализации указанных выше подходов в программном комплексе SIESTA, выбранном автором в качестве инструмента для проведения научных исследований. Также детально изложена авторская методика реализации в вычислительном эксперименте процедура исходного заполнения нанополостей плёнок графен/ОУНТ атомами щелочных металлов, которая обеспечивает энергетически выгодное распределение наполнителей по углеродному каркасу и предоставляет информацию о количестве связанных атомов.

Вторая глава диссертационной работы посвящена исследованию процесса заполнения нанополостей графен-нанотрубного композита кластерами кремния и атомами лития/натрия с позиции поиска наиболее оптимальной модификации графен/ОУНТ композитных тонких плёнок, обеспечивающей наибольшую удельную ёмкость при отрицательной энергии связи лития/натрия с атомным каркасом композита. Для композитных плёнок на основе ОУНТ (6,6) с закрытыми концами установлено, что наличие

кластеров кремния Si_{16} в случае заполнения нанополостей литием позволило увеличить удельную ёмкость композита на 37%, в случае заполнения натрием – на 22.2%. Кроме того, модификация кремнием позволила снизить электрическое сопротивление модифицированного композита на два порядка по сравнению с немодифицированным. Для плёнок с вертикально ориентированными открытыми нанотрубками (9,9), соединяющими три последовательно расположенных монослоя графена, выявлено, что для структур с расстоянием между графеновыми листами ~2 нм и шагом между ОУНТ ~ 5 нм оптимальная концентрация кремния в нанополостях композита составляет 13.0 мас.%, что больше ёмкости электрода из графита и электрода из ОУНТ на 35%.

В третьей главе диссертации представлены результаты исследования перетекания заряда между кластерами бора B_{12} и углеродным каркасом, а также влияния этого процесса на квантовую ёмкость композита с позиции поиска наиболее оптимальной модификации графен/ОУНТ композитных тонких плёнок, обеспечивающей наибольшую квантовую ёмкость и электропроводность. В ходе исследования установлено, что модифицирование композита с вертикально ориентированными закрытыми ОУНТ (6,6) икосаэдрическими кластерами бора B_{12} привело к существенному росту удельной квантовой ёмкости до 2.232 кФ/г при массовой доле бора 18.75%. Результаты расчета функции пропускания модифицированного бором композита показали отсутствие запрещенной зоны в электронном строении и рост электропроводности по мере увеличения массовой доли бора.

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

1. Заполнение нанополостей кластерами кремния Si_{16} , атомами лития и натрия является энергетически выгодным процессом, о чем свидетельствуют отрицательные значения величины энергии формирования композита в присутствии кластеров кремния и величин энергии связи атомов углерода с атомами лития и натрия.
2. Выявлен физический эффект снижения электрического сопротивления композита графен/ОУНТ в сотни раз при добавлении кластеров кремния Si_{16} за счет сдвига энергии Ферми в область разрешенных электронных состояний и перетекания заряда от кластеров кремния к углеродному каркасу.
3. Установлено, что для достижения максимальной удельной ёмкости композитных плёнок графен/ОУНТ с открытыми нанотрубками необходима массовая доля кремния 13~18%. Выявлено, что при избыточном заполнении кремнием нанополостей композитных плёнок

графен/ОУНТ удельная ёмкость снижается, так как не остается места для посадки лития в нанополостях композита.

4. Показано, что кластеры бора B_{12} в значительной степени увеличивают квантовую ёмкость (до ~ 2 кФ/г) композитных плёнок графен/ОУНТ с нанотрубкой (6,6) типа «кресло» путем внесения дополнительных электронных состояний.

При обсуждении диссертационной работы Колосова Д.А. были сформулированы следующие **замечания**:

1. Рассмотренные в работе атомистические модели имеют строгую упорядоченность и периодичность, однако в натуральных экспериментах подобные структуры имеют большое количество дефектов. В работе не аргументируется влияние структурных дефектов на электрофизические свойства.
2. В реальных электродах портативных источников энергии имеется медный или алюминиевый токоотвод, на который наносится активный (электродный) материал. В работе не рассмотрен случай влияния металлического токоотвода на электронные свойства исследуемого электронного материала.
3. В работе не указан практический способ заполнения нанополостей композитных пленок кластерами бора и кремния. В тоже время, литий и натрий довольно активные металлы, легко окисляющиеся на воздухе. В работе не комментируется заполнение нанополостей атомами лития и натрия.

Отмеченные замечания не снижают общей положительной оценки диссертационной работы Д.А. Колосова. Диссертация является цельной, логической стройной в рамках рассмотренной проблемы работой, посвящённой актуальной теме. Необходимо отметить несомненную значимость выявленных в работе физических закономерностей протекания тока и перетекания заряда в тонких композитных плёнках графен/ОУНТ, модифицированных кластерами кремния Si_{16} и бора B_{12} для развития электроники на углеродных наноструктурах. С фундаментальной точки зрения интерес к полученным результатам 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/ОУНТ, модифицированных кластерами кремния и бора, в качестве электропроводящего каркаса для изготовления электродов портативных источников энергии, суперконденсаторов, сенсоров, наноэмиттеров. Результаты диссертации найдут свое применение в научно-

исследовательских организациях (Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН (г. Москва), Институт радиотехники и электроники РАН и его филиалы, Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН (г. Томск), Института проблем сверхпластичности металлов РАН (г. Уфа), Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля РАН (г. Москва), Объединённый институт ядерных исследований (г. Дубна)), занимающихся исследованиями в области электроники на низкоразмерных структурах, а также в высших учебных заведениях при разработке ряда учебных дисциплин для студентов физико-математического профиля подготовки (Национальный исследовательский университет "МИЭТ" (г. Зеленоград), Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова (г. Москва), Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, (г. Саратов), Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю. А. (г. Саратов), Казанский федеральный университет (г. Казань), Волгоградский государственный технический университет (г. Волгоград), Волгоградский государственный университет (г. Волгоград), Башкирский государственный университет (г. Уфа), и др.).

По теме диссертации опубликовано 9 научных статей, 6 из которых опубликованы в изданиях, индексируемых международными информационно-аналитическими базами данных и системами научного цитирования Web of Science и/или Scopus, входящих в перечень изданий, рекомендованных ВАК РФ. Результаты работы докладывались и обсуждались на международных и всероссийских научных конференциях. Кроме того, материалы диссертационных исследований использовались при выполнении научных грантов РФФИ, а также грантов Президента РФ для поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук. Публикации по теме диссертации в полной мере отражают основные результаты диссертационной работы. Автореферат полностью соответствует задачам и результатам диссертационной работы.

Можно заключить, что диссертация Колосова Д.А. 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 Колосов Дмитрий Андреевич заслуживает

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

Отзыв рассмотрен и утвержден на заседании постоянно действующего научного семинара под председательством академика РАН А.Н. Саурова 24 ноября 2021 года.

Отзыв подготовлен д.т.н., доцентом,
начальником отдела
Разработок и исследований микро- и наносистем



Зенова Елена Валентиновна

Сведения о ведущей организации

Наименование: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт нанотехнологий микроэлектроники Российской академии наук.

Наименование краткое: ИНМЭ РАН

Адрес: 119991 г. Москва, Ленинский проспект, д. 32А.

Телефон: +7 (495) 938-19-04

Сайт: <https://inme-ras.ru>

Адрес электронной почты: org@inme-ras.ru