

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию Квашнина Александра Геннадьевича «Особенности образования новых квазидвумерных наноструктур и их физические свойства», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Одним из приоритетных направлений современной науки является исследование свойств наноструктур – объектов имеющих нанометровый размер хотя бы в одном из трех измерений. Многие наноструктуры, благодаря своим уникальным свойствам уже широко востребованы в современной технике. Так, например, углеродные нанотрубки и нановолокна используются в композитных материалах для повышения прочностных характеристик, двумерные и квазидвумерные пленки атомарной толщины (такие как графен) рассматриваются как основа для новой, двумерной электроники, а нанокластеры многих металлов проявляют уникальные каталитические свойства и широко применяются для синтеза новых материалов.

Теоретические исследования различных свойств наноструктур, таких как электронная структура, упругие и механические характеристики, термодинамическая устойчивость, химическая стабильность и др. позволяют проводить оценки потенциальных областей их применения. Стремительное развитие методов компьютерного моделирования позволяют проводить исследования разнообразных наноструктур, имеющих достаточно большие размеры. Следует отметить, что результаты моделирования обычно находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Диссертационная работа А.Г. Квашнина посвящена теоретическому исследованию с помощью квантовых расчетов физических и химических свойств сверхтонких пленок атомарной толщины различного состава, а также углеродных наноконусов. **Целью** исследований было применение первопринципных методов расчета для изучения упругих и электронных свойств квазидвумерных слоев различного состава, их фазовых превращений в зависимости от числа слоев, давления и химической адсорбции атомов. **Актуальность** исследований определяется, в первую очередь, высокой надежностью современных первопринципных методов расчета, а также перспективностью применений исследуемых наноструктур в оптоэлектронике и др. **Научная новизна** состоит в том, что автором впервые изучен эффект химически индуцированного фазового превращения многослойного графена в алмазную пленку, процесс расслаивания неуглеродных пленок в квазидвумерные слои, а также флексоэлектрический эффект в углеродных

наноструктурах. Считаю, что **тема диссертации** имеет как научный, так и практический интерес, она соответствует основным направлениям фундаментальных исследований по приоритетным направлениям науки, технологии и техники.

Диссертационная работа состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы из 148 наименований. Диссертация содержит 132 страницы машинописного текста и 53 рисунка.

Во **введении** сформулированы задачи диссертационной работы, показана актуальность и научная новизна проведенных исследований, приведены положения, выносимые на защиту.

В **первой** главе приведены основные данные о наиболее изучаемых двумерных материалах различного состава. Также описаны структура и классификация известных двумерных материалов, их электронные и механические свойства и способы их экспериментального получения. Вторая часть первой главы посвящена описанию теории функционала электронной плотности, который является основным методом исследования в данной работе.

Во **второй** главе диссертантом изучен эффект химически индуцированного фазового перехода, который заключается в фазовом превращении многослойного графена в сверхтонкую sp^3 -гибридизованную углеродную пленку только лишь под действием адсорбированных адатомов на поверхности пленки. Большое внимание автор уделил стабильности углеродных пленок и способам их экспериментального получения. Из предположения, что алмазные пленки могут быть получены путем соединения слоев многослойного графена, была построена фазовая диаграмма сосуществования многослойного графена и алмазных пленок, зависящая от толщины пленок и показано, что давление фазового перехода значительно уменьшается посредством химически индуцированного фазового перехода. Кроме того, диссертантом было показано, что различная упаковка слоев в многослойном графене приведет к образованию пленок не только со структурой кубического алмаза, но и со структурой гексагонального алмаза (лонсдейлита).

В **третьей** главе описан процесс экспериментального получения алмазных кластеров из аморфного углерода под действием электронного пучка посредством эффекта химически индуцированного фазового перехода. Показано, что активационный барьер перехода графитового кластера в алмазный кластер наблюдается только для кластеров меньше 14 нм, в то время как частицы большего размера не могут быть получены путем химической функционализации аморфных углеродных материалов.

В четвертой главе исследованы электронные, механические и упругие характеристики сверхтонких углеродных пленок как со структурой алмаза, так и со структурой лонсдейлита. Диссертантом было показано, что плёнки со структурой лонсдейлита будут обладать наибольшими механическими показателями по сравнению с алмазными плёнками, а также и в сравнении со всеми известными материалами, кроме кристалла лонсдейлита и графена.

Пятая глава диссертации посвящена описанию общего эффекта расщепления двумерных материалов различного состава, обладающих различной кристаллической структурой. Автором рассматриваются соединения с алмазной структурой (C, Si), со структурой цинковой обманки (BN, BP, SiC) и каменной соли (NaCl). Показано, что эффект графитизации в сверхтонких пленках описанных соединений энергетически выгоден, что приводит к расщеплению структуры пленок на графитоподобные слои. Данный эффект детально исследован на примере структуры хлорида натрия. Изучены основные физические свойства, как объемной фазы, так и сверхтонких пленок нанометровой толщины. Детально исследованы причины расслоения сверхтонких пленок кубической фазы NaCl, а также исследованы электронные и механические свойства пленок в зависимости от их толщины.

В шестой главе диссертации исследован флексоэлектрический эффект в различных sp^2 -гибридизованных углеродных наноструктурах, а также зависимость флексоэлектрического дипольного момента от размера наноструктур на примере углеродных наноконусов. Полученная автором методика позволяет оценить величину флексоэлектрического дипольного момента для всех типов углеродных наноструктур, что позволяет предсказывать флексоэлектрический дипольный момент в графеноподобных углеродных наноструктурах.

Следует отметить некоторые замечания по тексту диссертации:

1. В случае многослойных квазидвумерных наноструктур присутствует Ван-дер-Ваальсовый вклад в межатомное взаимодействие. В диссертации возможное влияние этого вклада на полученные результаты не обсуждается.
2. На рис. 2-6 представлена зависимость полной электронной энергии от объема ячейки многослойных пленок алмаза и графена. В обсуждении и в подписи к рисунку вычисленная энергия называется «упругой энергией», что затрудняет понимание рисунка.
3. В диссертации не приведены параметры первопринципных расчетов и ячеек моделируемых наноструктур.
4. Имеется ряд опечаток в тексте.

Данные замечания не умаляют общей, безусловно, положительной оценки диссертационной работы Квашнина А.Г. Материалы диссертации представлялись в ряде докладов на международных конференциях, опубликованы в 11 статьях в ведущих российских и международных журналах. Диссертация является завершенной научной квалификационной работой.

Автореферат полно и правильно отражает основные результаты и выводы работы и соответствует тексту диссертации.

Считаю, диссертационная работа А. Г. Квашнина удовлетворяет требованиям Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. N842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор, Квашнин Александр Геннадьевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Главный научный сотрудник
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Институт спектроскопии
Российской академии наук (ИСАН)
доктор физико-математических наук

Адрес служебный: 142190 г. Москва, Троицк
ул. Физическая, 5, ИСАН РАН

Тел.: +74958510579

e-mail: mavrin@isan.troitsk.ru

Б.Н. Маврин

Маврин Борис Николаевич

10.02.2016

Подпись Маврина Б.Н. заверяю:

Ученый секретарь ИСАН РАН

к.ф.-м.н.



Перминов Евгений Борисович