

ОТЗЫВ

официального оппонента Подливаева Алексея Игоревича на диссертационную работу 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.

Актуальность представленной работы обусловлена особым интересом, который вызывают двумерные наноструктуры - уникальные объекты исследования современной физики и химии. Получаемая информация об их свойствах необходима для разработки технологии синтеза нанообъектов с заданными свойствами, отвечающими потребностям электронной техники. Основная часть диссертации посвящена графену и материалам на его основе, что связано с их экстремальными электронными и механическими характеристиками.

Высокая степень обоснованности всех научных положений и выводов обусловлена тем, что среди множества подходов к исследованию объектов нанометрового размера диссертантом выделен перспективный метод расчета из первых принципов, который позволяет адекватно определить электронные и механические свойства изучаемой системы с помощью решения уравнений квантовой механики, избегая, к тому же, дорогостоящих экспериментов.

Диссертантом представлено детальное исследование стабильности, электронных свойств и механические характеристик ряда двумерных материалов различного состава. Были изучены квазидвумерные углеродные и неуглеродные пленки, а также наноконусы на основе графена, которые рассматриваются как перспективные элементы наноэлектроники.

Изучен новый эффект химически индуцированного фазового перехода многослойного графена в сверхтонкую алмазную пленку под действием адсорбции атомов на поверхности. Показано, что при некоторой химической обработке, критическое давление фазового перехода многослойного графена в сверхтонкую алмазную пленку может быть снижено.

Построена фазовая диаграмма перехода многослойного графена в сверхтонкие алмазные пленки, как под действием давления, так и под действием химической адсорбции атомов водорода на поверхность графена. Показано, что многослойный графен с различной упаковкой слоев может быть превращен как в пленки со структурой кубического алмаза, так и в пленки со структурой гексагонального алмаза (лонсдейлита). Определены электронные, транспортные и механические характеристики таких пленок.

Диссертантом предсказан эффект графитизации сверхтонких пленок с различной кристаллической структурой. Изучены сверхтонкие пленки со

структурой алмаза, цинковой обманки и каменной соли. Получены значения критического количества слоев, при котором будет происходить спонтанное расслоение этих соединений.

Определен характер влияния геометрических параметров углеродных наноконусов на величину флексоэлектрического дипольного момента, возникающего в результате искривления графенового листа.

Результаты научных исследований диссертанта являются новыми и обладают научной ценностью.

Достоверность теоретических результатов обеспечивается расчетом предельных случаев и их согласием с имеющимися литературными данными.

Текст диссертации изложен на 132 страницах машинописного текста, содержит 3 таблицы, 53 рисунка и список использованных литературных источников из 148 наименований. Основные материалы диссертации в соответствии с прилагаемым авторефератом изложены в 11 печатных работах, входящих в базы данных Web of Science, Scopus и РИНЦ.

Отмечу следующие недостатки представленной работы:

1. В автореферате и на странице 12 пояснительной записки указано, что результаты диссертационной работы представлены в 25 публикациях, 11 из которых – в реферируемых журналах. В автореферате эти 11 основных публикаций даны отдельным списком, но в тексте пояснительной записки список этих работ отсутствует. Более того, в общем списке цитируемой литературы из 148 источников упоминаются только 4 работы диссертанта. Считаю, недостатком отсутствие в тексте пояснительной записки полного перечня всех 25 работ (включая тезисы конференций).
2. При описании программного обеспечения квантово-химических расчетов указан пакет LAMMPS, позволяющий проводить расчеты с эмпирическими потенциалами, а в последней главе указан пакет SIESTA, позволяющий проводить расчеты в рамках LDA, однако непонятно какими пакетами рассчитывались в предыдущих главах задачи в приближениях DFT и GW.
3. Считаю избыточно подробным изложение основ теории функционала электронной плотности на страницах 28-40.

Перечисленные выше замечания являются, однако, либо техническими, либо не принципиальными и не снижают научной ценности представленной работы.

Диссертация представляет завершенное научное исследование. Объем и качество проведенных исследований заметно превышают средний уровень диссертации на соискание степени кандидата физико-математических наук.

Работа обладает предсказательной силой в прогнозировании свойств наноструктур и технологических процедур их получения.

Выполненное в работе исследование обладает научной новизной, практической значимостью и соответствует пунктам 1, 3, 5 паспорта специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Автореферат и опубликованные работы полностью отражают основное содержание диссертации. Считаю, что рецензируемая диссертационная работа отвечает требованиям ВАК РФ и пунктам 9 и 10 Положения о присуждении ученых степеней (постановление Правительства РФ от 29.09.2013 №842), предъявляемых к кандидатским диссертациям. Считаю, что автор Квашнин Александр Геннадьевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Доцент кафедры «Физика твердого тела и наносистем» федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования

«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,

кандидат физико-математических наук  Алексей Игоревич Подливаев

Адрес служебный: 115409, г. Москва, Каширское шоссе, 31

Тел. +7 495 788-56-99, доб. 8728

e-mail: AIPodlivayev@mephi.ru



Григорьев Александр Иванович