

ОТЗЫВ

научного консультанта на диссертационную работу Дуйсеновой Айнура Гайсиевны на тему: «Моделирование особенностей транспортных свойств электронных нанопризм на основе фуллереноподобных материалов», представленную на соискание степени доктора философии (PhD) по специальности 8D05301 – Физика

С развитием научно-технологической базы электроники наблюдается постепенная миниатюризация ее электронных компонентов, в свою очередь приводящего к функциональному и структурному усложнению электронных систем, повышению их надежности и быстродействия, уменьшению потребляемой энергии и т.п. Существенное увеличение плотности размещения и уменьшения размеров электронных компонентов скорее будет возможна на базе принципиально новых идей. В настоящее время уже созданы прототипы нанoeлектронных устройств, обладающие уникальными электрофизическими характеристиками. Активно ведутся работы по развитию новых направлений нанoeлектроники. Как один из перспективных материалов электронной техники предложены Ван-дер-Ваальсовы наноструктуры, представляющие собой набор изолированных атомных плоскостей, связанные между собой Ван-дер-Ваальсовой силой и собранные по заранее выбранной последовательности. Последние годы интенсивно исследуются электронные и оптические свойства подобных Ван-дер-Ваальсовых наноструктур из-за их привлекательности для разработки новых квантовых технологий, а также обнаружению новых фундаментальных квантовых явлений. Подобные наноструктуры является объектом исследования диссертационной работы Дуйсеновой А.Г.

В качестве новых научных результатов диссертантом выдвинуты следующие положения, определяющие, на мой взгляд, интересные электротранспортные свойства Ван-дер-Ваальсовых наноструктур:

1. Комбинация фуллеренов с разными диаметрами образующие нанопереход типа «ядро-оболочка» приводит к увеличению количества резонансных пиков спектра пропускания, исчезновению щели между высшей занимаемой молекулярной орбиталью и низшей свободной молекулярной орбиталью, уменьшению площади кулоновского алмаза на диаграмме стабильности заряда.

2. В коаксиально соединенных между собой силой Ван-дер-Ваальса полипризматических нанотрубках ($C_{[14,17]}$ - $C_{[14,11]}$ - $C_{[14,5]}$) проявляется диодный эффект из-за образования барьера Шоттки между металлическим ($C_{[14,17]}$, $C_{[14,11]}$) и полупроводниковым ($C_{[14,5]}$) призмами.

3. При закрутке пассивного графена на муаровые углы $\sim 4^\circ$ и $\sim 12^\circ$ в ненапряженном (и напряженном) состоянии открывается модулированная щель, величина которой варьируется 1,66 - 1,82 эВ и 3,78 - 4,69 эВ (2,27 - 2,67 эВ и 4,28 - 4,93 эВ), соответственно. Вольтамперная характеристика ненапряженного и напряженного графенов имеют участки с отрицательным дифференциальным сопротивлением, проявляющиеся в различных значениях напряжения в зависимости от параметров муаровой структуры.

Среди основных результатов диссертации я выделю, прежде всего, результаты исследования транспортных свойств двумерных Ван-дер-Ваальсовых наноструктур, которые с большей вероятностью применимы для разработки новых элементов электроники.

Также отмечу, что диссертационная работа выполнена при поддержке грантов Комитета науки Министерства науки и высшего образования Республики Казахстан «Исследование квантово-транспортных характеристик наносистем с уникальными эксплуатационными электрическими и магнитными свойствами» (AP08052562) на 2020-2022 годы, а также «Атомистическое моделирование разрушения полупроводниковых структур электромагнитными импульсами» (AP14869773) на 2022-2024 годы.

Все основные результаты, включенные в диссертацию, получены с непосредственным участием диссертанта. Подчеркну, что А.Дуйсенова решает очень широкий круг задач: начиная от разработки и оптимизации геометрической модели наноустройств, требующую глубокое знание и применение метода молекулярной динамики, до расчетов электротранспортных характеристик, требующую умение адекватного применения теории функционала электронной плотности в сочетании с методом неравновесных функций Грина. Кроме того, диссертант продемонстрировал как знание основ теории физики, так и высокий уровень владения современными пакетами атомистического моделирования типа Atomistix ToolKit with Virtual NanoLab (ATK VNL), которые сейчас являются основным инструментом исследователей в области физики твердого тела и материаловедения. Одним из основных достоинств А.Дуйсеновой, на мой взгляд, является умение качественной обработки полученных численных данных и правильной интерпретации полученных результатов, а также стремление проявить разумную инициативу и творческий подход к решению поставленных задач.

Все полученные научные результаты обоснованы, и не противоречат общим законам физики. В диссертационной работе для сравнения результатов моделирования приведены ссылки на достаточное количество работ последних лет. Достоверность результатов не вызывает сомнений и обеспечивается использованием современных

лицензионных квантово-химических программных пакетов, основанных на методах теории функционала электронной плотности (из первых принципов), а также публикацией в научных журналах с высокими показателями.

Научные результаты (научные положения), выводы и заключения, сформулированные соискателем в диссертационной работе, являются новыми, которые позволяют описать транспортные свойства Ван-дер-Ваальсовых фулереноподобных наноструктур. В работе приведены научные результаты, позволяющие оценить квантово-транспортных свойств Ван-дер-Ваальсовых фулереноподобных наноструктур и использовать их для создания элементной базы наноэлектроники (одноэлектронные транзисторы, нанодиоды и т.п.).

Апробация научных положений и выводов диссертации осуществлена публикацией в периодических изданиях с высоким квартилем Q1, Q2 и обсуждением в разных международных научных конференциях.

В целом она является сложившимся высококвалифицированным специалистом, способным самостоятельно на высоком уровне решать научные задачи в области физики конденсированного состояния.

Таким образом, диссертационная работа Дуйсеновой А.Г. представляет собой завершённую научно-исследовательскую работу на актуальную тему и соответствует предъявляемым требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание степени доктора философии (PhD) по специальности 8D05301 – Физика, а ее автор заслуживает присуждения ей степени доктора философии (PhD) по специальности 8D05301 – Физика.

Ведущий научный сотрудник
Физико-технического института
низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины,
доктор физико-математических наук, профессор


А. Л. Соловьёв

Подпись Соловьёва А.Л. заверяю.
Заместитель директора по научной работе
ФТИНТ им. Б.И. Веркина НАН Украины,
доктор физико-математических наук, профессор




А.В. Долбин