

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Р.Д. Ямалетдинова
**«ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ С ПАМЯТЬЮ:
ГРАФЕНОВЫЙ МЕМКОНДЕНСАТОР И ОПТОМЕМРИСТОР НА ОСНОВЕ
НИТРОЗОКОМПЛЕКСОВ РУТЕНИЯ»**,

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

В последние годы, всё заметнее проявляется замедление развития вычислительных устройств: размеры транзисторов, как и скорость их переключения уже практически подошли к физическим пределам используемых материалов. Одним из возможных дальнейших направлений для развития вычислительной техники является концепция вычислений в памяти, включая развитие нейроморфных схем. Такой подход позволяет на порядки увеличить скорость решения ряда задач, связанных с областью искусственного интеллекта. Наиболее перспективные результаты в этой области были достигнуты с использованием мемрестивных элементов. Такие элементы могут быть использованы как для хранения, так и для обработки информации. Исследование автором нитрозокомплексов рутения и графена в контексте создания на их основе новых мемрестивных элементов является актуальным направлением современного материаловедения и приборостроения.

Научная новизна работы состоит в описании процесса изомеризации нитрозокомплексов рутения, численно и экспериментально установлены кинетические характеристики данных процессов для ряда аминоккомплексов нитрозорутения. Показана возможность создания оптического аналога мемристора и его возможные области применения. Автором найдены ряд неописанных стабильных конформаций графена, установлены наиболее стабильные из них. Изучены свойства графеновых кинков, образующихся на сжатой мембране.

Практическая значимость работы состоит в описании функционирования и разработки простых аналитических моделей переключения оптомемристора и мембранного мемконденсатора.

Достоверность полученных результатов обусловлена высоким методологическим уровнем проведения работы, использованию проверенных методов моделирования и согласованности полученных результатов с существующими экспериментальными и теоретическими работами. Дополнительным свидетельством качества работы является наличие 6 публикаций в высокорейтинговых международных и российских журналах, которые входят в перечень индексируемых в международной системе научного цитирования Web of Science, а также представление работы на российских и международных конференциях, опубликованных в 9 тезисах. Количество статей и перечень научных журналов, в которых опубликованы основные результаты диссертации, соответствуют требованиям ВАК Российской Федерации, предъявляемым к кандидатской диссертации. Сформулированные автором положения, выносимые на защиту, являются обоснованными, так как базируются на корректном применении современных методов и на согласованности с известными литературными данными.

Соответствие специальности 02.00.04 – физическая химия. Диссертационная работа соответствует п. 1 «Экспериментальное определение и расчет параметров строения молекул и пространственной структуры веществ», п. 2 «Экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций простых и сложных систем, в том числе на основе методов статистической термодинамики, изучение

термодинамики фазовых превращений и фазовых переходов», и п. 8 «Динамика элементарного акта при химических превращениях» паспорта специальности **02.00.04 – физическая химия.**

Диссертация состоит из введения, трех глав, выводов и списка литературы из 142 наименований. Объем диссертации 118 страниц, включая 44 рисунка и 10 таблиц.

Во введении раскрыта актуальность темы, определены цели и задачи исследования, сформулирована научная новизна, практическая значимость работы и положения, выносимые на защиту.

В первой главе автор приводит обзор литературы по теме работы, включающий в себя обзор мемристивных систем, исследуемых элементах и их аналогах, их области возможного применения и свойства исследуемых материалов.

Во второй главе автором описаны результаты исследования свойств изучаемых материалов. Основываясь на квантово-химическом моделировании, автор показал, что термическая стабильность нитрозокомплексов связана со сродством к электрону лиганда, находящегося в транс положении к NO группе, что связано с необходимостью частичного переноса электронной плотности с лиганда на на разрыхляющую π^* -орбиталь связи Ru-ON. Дополнительно, методами колебательной спектроскопии (ИК, КРС) были зарегистрированы метастабильные состояния ряда комплексов. Исходя из данных кинетического эксперимента уточнены механизмы фотоиндуцированных процессов в данных соединениях.

В работе Ямалетдинова Р.Д. предлагается методология поиска конформаций графена, использование которой позволило определить ряд новых, ранее не описанных конформаций графена. Исследование процесса переключения длинной сжатой мембраны были определены и описаны переходные состояния соединяющие два локальных минимума.

В третьей главе автор описывает концепцию оптомемристора (оптического сопротивления с памятью), строит обобщенную аналитическую модель его работы, и проводит моделирование функционирования такого устройства на основе нитрозокомплексов рутения. Дополнительно, автор показывает возможные области использования оптомемристора — создание оптических элементов памяти и конструирование оптических нейроморфных схем.

Вторая часть данной главы посвящена изучению механизмов переключения мембранного мемконденсатора. Так, после проведения моделирования процесса переключения для ряда геометрий и анализа полученных результатов, автор строит упрощенную аналитическую модель переключения мемконденсатора.

Из недостатков диссертационной работы можно упомянуть следующее.

- 1) На стр. 5 в (1) приведено общее описание функционирования элементов с памятью, но из данной формулы не видно, как реализуется состояние с памятью, т.е. связь с предысторией элемента (эффект гистерезиса), что идеологически не верно.
- 2) В тексте много неудачных или небрежных по использованию терминов (жилки и др.) и выражений, например - “Новое поколение памяти”, “зигзагообразный графен” и др.
- 3) На стр. 13 близкое по смыслу замечание касается определения вольтамперной характеристики (ВАХ) мемристора, где сказано, что ВАХ такого элемента при нулевом токе проходит через ноль, и в то же время в нем наблюдается гистерезис.
- 4) Смысл Рис. 19, посвященный сравнению потенциалов, не совсем ясен.


- 5) На стр. 64 приведена фраза “Известно, что свободный графен термодинамически не стабилен и под действием тепловых флуктуаций имеет тенденцию к образованию “скомканных” структур, хотя в [J.C. Meyer et al., Nature 446, 60 (2007)] было показано, что ангармоническое взаимодействие плоских и изгибных фононов ведет к стабилизации графеновой мембраны” и к возникновению волн (а не скомканности) на поверхности графена.
- 6) В описании МД расчетов приведено значение приложенной силы 14 нН / атом. При переводе этой величины в стандартно используемые в квантово-химических программах eV/Å получается значение силы/атом в ~ 9 eV/Å. При таких огромных силах обычно любые структуры разваливаются при оптимизационных или МД расчетах. Аналогичное замечание касается анализа работы переключения состояния мемконденсатора на стр. 99, где применена сила в $F=13$ эВ/Å).
- 7) Невозможность получить в МД симуляциях спиральное состояние (G) с низшей энергией, очевидно, связана с, как правильно отмечено автором, “практически нулевым начальным моментом импульса системы”. Поэтому непонятно, почему в проведенных исследованиях автор ограничивался только продольным растяжением ленты, без включения поперечных деформаций, что могло бы привести к появлению новых низкоэнергетических решений, реализуемых при наличии первоначального момента импульса системы.
- 8) Странно, что многочисленные МД вычисления кинков и антикинков в параграфе 2.2.3, показывающие низкоэнергетические способы переключения двух устойчивых изгибных состояний зажатой графеновой ленты были полностью проигнорированы при расчете переключения мемконденсатора, хотя это можно реализовать технически.
- 9) Также вызывает сожаление то, что при многочисленных анализах состояний мемконденсатора совершенно отсутствует информация, интересная для практиков, стремящихся реализовать такие элементы- времена и энергии переключения, требуемые для этого напряжения и др.. Это значительно снижает ценность таких исследований.

Тем не менее, приведенные замечания не уменьшают достоинств диссертации. Р.Д. Ямалетдиновым на высоком профессиональном уровне выполнена объемная исследовательская работа, результаты которой имеют большую научную и практическую ценность.

Считаю, что данные, представленные в диссертации, свидетельствуют о том, что диссертационная работа «ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕМЕНТОВ С ПАМЯТЬЮ: ГРАФЕНОВЫЙ МЕМКОНДЕНСАТОР И ОПТОМЕМРИСТОР НА ОСНОВЕ НИТРОЗОКОМПЛЕКСОВ РУТЕНИЯ» соответствует требованиям, предъявляемым ВАК Российской Федерации к кандидатской диссертации, изложенным в пункте 9 «Положения о присуждении ученых степеней», а ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Фёдоров Александр Семёнович

Доктор физико-математических наук, Ведущий научный сотрудник лаборатории физики магнитных явлений ФГБУН Института физики им Л.В. Киренского СО РАН — обособленное подразделение ФИЦ КИЦ СО РАН

 /А.С. Фёдоров/

«31» января 2019 г.

660036, г. Красноярск,
Академгородок д.50, стр. 38
тел. +7 (391) 249-45-56
alex99@iph.krasn.ru

Подпись д.ф.-м.н., ведущего научного сотрудника лаборатории физики магнитных явлений ИФ СО РАН А.С. Фёдорова заверяю

Ученый секретарь
ИФ СО РАН,
к.ф.-м.н.


А.О. Злотников/