

## Отзыв

на диссертацию Аникеева Никиты Андреевича

### «МОДИФИЦИРОВАННЫЙ ПИРОЛИЗОВАННЫЙ ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛ В ТВЕРДОТЕЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОНИКЕ: ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ И СВОЙСТВ»,

представленную на соискание ученой степени кандидата физико –  
математических наук по специальности 05.27.01 – Твердотельная  
электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и  
наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах

Возросшие возможности современных методов квантовой химии позволяют достаточно точно рассчитывать математические модели наноструктур различных материалов для дальнейшего их применения в твердотельной электронике, микро- и наноэлектронике.

Диссертация Аникеева Н. А. посвящена теоретическому исследованию электронно-энергетического строения, модифицированного пиролизованного полиакрилонитрила.

Данная область исследования является традиционной для научной группы, возглавляемой научным руководителем Аникеева Н. А., и результаты исследований данной группы хорошо известны специалистам. Как известно, полиакрилонитрил является диэлектриком, однако при термообработке исследуемого материала получается широкозонный полупроводник, а модификация его различными атомами, в том числе атомами металлов, приводит к изменению проводящих свойств в связи с изменением значения ширины запрещенной зоны. Также существует возможность использования, модифицированного пиролизованного полиакрилонитрила (ППАН) в качестве чувствительного элемента газового сенсора. Сопоставление экспериментальных и теоретических данных, полученных в работе, говорят о возможностях для реального применения на практике исследуемых объектов на основе модифицированного ППАН.

Достоверность результатов определяется теоретической обоснованностью математических моделей, строгими математическими и физическими методами исследования. Полученные в диссертации выводы не противоречат основным физическим закономерностям, для обобщающих результатов выполняется предельный переход к частным, ранее известным решениям. Следует отметить и общий высокий математический уровень работы.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы.

Во введении обоснована актуальность рассматриваемых вопросов, цель работы, научная новизна, научная и практическая значимость, а также основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена обзору литературы по теме диссертации и содержит обзор последних достижений в исследованиях пиролизованного полиакрилонитрила.

Во второй главе диссертации приводятся основные уравнения расчетных схем для рассматриваемых моделей исследуемых систем. В качестве основной расчетной схемы в диссертационной работе выбран неэмпирический расчетный метод функционала плотности, который хорошо применим для исследуемых моделей. Так же рассмотрено применение модели молекулярного кластера по отношению к исследуемому объекту.

В третьей главе представлены результаты исследования процессов взаимодействия одно- и двухслойного пиролизованного полиакрилонитрила с молекулами  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $F_2$  и  $CO_2$ . Было установлено, что при взаимодействии упомянутых молекул с поверхностью ППАН происходит изменение значения ширины запрещенной зоны в сторону металлизации в случае с  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $F_2$  и увеличение ширины запрещенной зоны при взаимодействии поверхности ППАН с молекулой углекислого газа, что также подтверждается экспериментальными данными.

Четвертая глава посвящена изучению пиролизованного полиакрилонитрила, модифицированного атомами металлов и их парными соединениями. Полученные результаты теоретических исследований согласуются с экспериментом и определяют возможность использования ППАН, модифицированного атомами металлов, в качестве поглотителей электромагнитного излучения определенных частот. Определено значение ширины запрещенной зоны для исследуемых систем, которое в свою очередь определяет проводящие свойства металлокомпозитов. Расчеты, выполненные при полной оптимизации геометрии поверхности и полученные в результате расчетов значения энергии связи, говорят о стабильности исследуемых наноструктур.

Выводы и заключение полно отражают содержание диссертации.

Вместе с тем, диссертация Аникеева Н. А. не лишена отдельных недостатков:

1. Во второй главе не указаны границы применимости исследуемой математической модели, откуда создается впечатление, что данная модель применима везде и всегда, что заведомо не так.

2. В третьей главе нет ни малейшего упоминания о чувствительности материала к газам, что является основным параметром при исследовании сенсорных элементов.

3. В четвертой главе диссертации указание на реальное использование материала (стр. 109) выпадает из логики повествования и оставляет недоумение. Более разумно, на наш взгляд, было бы вынести данное указание в отдельный параграф.


4. В диссертации и автореферате есть ряд неточностей в оформлении. Список литературы в автореферате оформлен не по правилам. То же самое в диссертации. Например, ссылка 103. На стр. 62 в табл. 3.2.1. непонятен смысл варианта 4 с прочерками во всех графах. На стр. 120 рис. 4.4.3.3. обозначения осей совмещены с самим полем рисунка.

Приведенные недостатки, однако, не снижают высокой оценки диссертационного исследования и общего впечатления от работы Аникеева Н.А. и носят, скорее, характер пожеланий.

На основании вышеуказанного считаю, что диссертационная работа Аникеева Н. А. является законченным научным трудом и соответствует всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым кандидатским диссертациям. Автореферат полностью отражает содержание диссертации. Автор диссертации Аникеев Никита Андреевич заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.27.01 – Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах.

Официальный оппонент:

Доктор физико-математических наук,  
профессор, профессор кафедры  
информатики и математики ЧОУ ВО  
"Волгоградский Институт Бизнеса",  
400010, Волгоград, ул. Качинцев д. 63,  
эл. почта mbelonenko@yandex.ru ,  
тел. 8 8442 224160



М.Б. Белоненко

*Годился профессором  
ученой задержкой  
сервисами*



*Белоненко М.Б.  
Лисина Л.И.*