

**УТВЕРЖДАЮ:**

Проректор по научной работе и цифровому развитию  
ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»

Алексей Александрович Короновский

«12» сентября 2021 г.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения  
высшего образования «Саратовский национальный исследовательский  
государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»

по диссертации **Колосова Дмитрия Андреевича** «Закономерности электронного транспорта и перетекания заряда в тонких плёнках на основе графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками при модификации нанополостей плёнок молекулярными кластерами бора и кремния» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.04 — «Физическая электроника», выполненной на кафедре радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского».

Тема диссертационной работы утверждена приказом ректора СГУ от 26 декабря 2017 года № 242-Д, переутверждена приказом ректора СГУ от 17 февраля 2021 года №14.1-Д.

Соискатель **Колосов Дмитрий Андреевич** окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского» в 2017 г. по направлению 03.04.03 «Радиофизика» с присвоением квалификации «Магистр».

Справка об обучении № 90.1-2021 выдана 08 сентября 2021 года федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского».

В период подготовки диссертации по настоящее время соискатель обучается в аспирантуре ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского» по направлению подготовки 03.06.01 «Физика и астрономия», направленность «Физическая электроника», работает ассистентом кафедры радиотехники и электродинамики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского».



Научный руководитель — Глухова Ольга Евгеньевна, доктор физико-математических наук, профессор, заведующая кафедрой радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского», утвержденная приказом ректора СГУ от 26 декабря 2017 года № 242–Д, представила положительный отзыв о диссертации и соискателе.

Научную экспертизу диссертация проходила на расширенном заседании кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского» с приглашением специалистов по профилю диссертации из других структурных подразделений СГУ и других образовательных учреждений высшего образования и научных организаций.

На заседании присутствовали:

1. *Аникин Валерий Михайлович*, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой компьютерной физики и метаматериалов на базе СФ ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
2. *Четвериков Александр Петрович*, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры радиофизики и нелинейной динамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
3. *Шараевский Юрий Павлович*, доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник лаборатории «Магнитные метаматериалы» ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
4. *Рыскин Никита Михайлович*, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник СФ ИРЭ РАН, заведующий кафедрой динамических систем на базе СФ ИРЭ РАН института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
5. *Москаленко Ольга Игоревна*, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры физики открытых систем института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
6. *Глухова Ольга Евгеньевна*, доктор физико-математических наук, профессор, заведующая кафедрой радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
7. *Попов Вячеслав Валентинович*, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник СФ ИРЭ РАН;



8. *Давидович Михаил Владимирович*, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
9. *Тен Галина Николаевна*, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
10. *Ермолаев Игорь Анатольевич*, доктор физико-математических наук, профессор кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
11. *Пластун Инна Львовна*, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры «Информационная безопасность автоматизированных систем» института электронной техники и приборостроения ФГБОУ ВО «Саратовский государственный технический университет им. Гагарина Ю.А.»;
12. *Герасименко Александр Юрьевич*, кандидат физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник отдела математического моделирования Образовательно-научного института наноструктур и биосистем наноструктур и биосистем ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
13. *Слепченков Михаил Михайлович*, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
14. *Адилова Асель Булатовна*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры нелинейной физики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
15. *Гребенюк Константин Александрович*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
16. *Шунаев Владислав Викторович*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского».

Рецензенты диссертации:

*Четвериков Александр Петрович*, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры радиофизики и нелинейной динамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского» представил положительный отзыв.



*Герасименко Александр Юрьевич*, кандидат физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник отдела математического моделирования Образовательно-научного института наноструктур и биосистем ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского» представил положительный отзыв.

По итогам обсуждения диссертации принято следующее заключение:

### **Заключение**

по диссертации **Колосова Дмитрия Андреевича** «Закономерности электронного транспорта и перетекания заряда в тонких плёнках на основе графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками при модификации нанополостей плёнок молекулярными кластерами бора и кремния» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.04 — «Физическая электроника».

В диссертации Колосова Д.А. с помощью квантово-механических и молекулярно-динамических методов моделирования решается актуальная задача физической электроники по анализу влияния модификаций кластерами кремния  $Si_{16}$  и бора  $B_{12}$  атомного строения тонких композитных плёнок, образованных слоистым графеном и вертикально ориентированными углеродными нанотрубками (ОУНТ) субнанометрового диаметра с металлическим типом проводимости, на характер протекания в них фундаментальных физических явлений – квантового транспорта электронов и перераспределения заряда. На основании полученных результатов исследования выявлены структурные конфигурации модифицированных плёнок с улучшенными электронно-энергетическими и электрофизическими характеристиками, перспективные в качестве электропроводящего каркаса для создания электродов портативных устройств.

### **Научная новизна результатов работы.**

1. Выявлено, что при формировании тонких композитных графен/ОУНТ плёнок с вертикально ориентированными закрытыми нанотрубками типа «кресло» и «зигзаг» субнанометрового диаметра с металлическим типом проводимости наиболее энергетически стабильными являются пленки с нанотрубками длиной  $\sim 1,3$  нм и диаметром  $\sim 0,8$  нм.



2. На примере структур тонких композитных плёнок графен/ОУНТ с нанотрубкой (6,6) типа «кресло» показано, что заполнение нанополостей (пространства между соседними вертикально ориентированными ОУНТ) кластерами кремния  $Si_{16}$ , атомами лития и натрия является энергетически выгодным процессом, о чем свидетельствуют отрицательные значения величины энергии формирования композита в присутствии кластеров кремния и величин энергии связи атомов углерода с атомами лития и натрия.

3. Выявлен физический эффект снижения электрического сопротивления композита графен/ОУНТ в сотни раз при добавлении кластеров кремния  $Si_{16}$  за счет сдвига энергии Ферми в область разрешенных электронных состояний и перетекания заряда от кластеров кремния к углеродному каркасу. Показано, что добавление атомов лития и натрия в структуру графен/ОУНТ с кластерами кремния приводит к еще большему снижению сопротивления за счет появления дополнительных каналов проводимости вблизи энергии Ферми.

4. Установлено, что для достижения максимальной удельной ёмкости композитных плёнок графен/ОУНТ с открытыми нанотрубками необходима массовая доля кремния 13~18%. Выявлено, что при избыточном заполнении кремнием нанополостей композитных плёнок графен/ОУНТ удельная ёмкость снижается, так как не остается места для посадки лития в нанополостях композита

5. Показано, что кластеры бора  $B_{12}$  в значительной степени увеличивают квантовую емкость (до  $\sim 2$  кФ/г) композитных плёнок графен/ОУНТ с нанотрубкой (6,6) типа «кресло» путем внесения дополнительных электронных состояний.

6. Разработана и программно реализована оригинальная методика заполнения нанополостей графен/ОУНТ плёнок и вычисления количества связанных атомов, обеспечивающая энергетически выгодное распределение наполнителей по углеродному каркасу и позволяющая достаточно быстро реализовывать серию численных экспериментов с многоатомными супер-ячейками.

### **Научно-практическая значимость**

Выявленные физические закономерности протекания тока и перетекания заряда в тонких композитных плёнках графен/ОУНТ, модифицированных кластерами кремния  $Si_{16}$  и бора  $B_{12}$ , представляют большой интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. С фундаментальной точки зрения интерес определяется реализацией возможности топологического



управления электронным строением подобных композитных плёнок, варьируя типом и массовой долей модифицирующих кластеров. Практический интерес обусловлен открывающимися перспективами использования композитных плёнок графен/ОУНТ, модифицированных кластерами кремния и бора, в качестве электропроводящего каркаса для изготовления электродов портативных источников энергии, суперконденсаторов, сенсоров, наноэмиттеров.

Результаты диссертационной работе использовались при выполнении грантов РФФИ № 19-32-90160, №18-32-01003, а также грантов Президента РФ для поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (проекты № МК-2289.2021.1.2 и МК-2373.2019.2)

**Ценность научных работ** соискателя определяется тем, что представленные в них результаты расширяют современные представления об особенностях квантового транспорта электронов в композитных плёнках на основе слоистого графена и вертикально ориентированных ОУНТ с металлическим типом проводимости.

**Апробация работы.** Результаты, представленные в диссертации, докладывались на следующих школах, семинарах и конференциях:

- XXVIII Международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых ученых «Ломоносов» (Москва, 2020 г.);
- Всероссийская конференция молодых ученых «Нанoeлектроника, нанофотоника и нелинейная физика» (Саратов, 2019, 2020, 2021 гг.);
- Международная школа для молодых ученых по оптике, лазерной физике и биофотонике «Saratov Fall Meeting» (Саратов, 2018, 2019, 2020 гг.);
- 9-й Научно-практической конференции Presenting Academic Achievements to the World (Саратов, 2018);
- Ежегодная школа-конференция «Нелинейные дни в Саратове для молодых» (Саратов, 2017).

Результаты работы также неоднократно обсуждались на научных семинарах кафедры радиотехники и электродинамики и отдела математического моделирования СГУ.

**Личный вклад.** Все представленные в диссертации результаты были получены лично соискателем. Соискателем осуществлялось построение атомистических моделей композитных структур графен/ОУНТ, выполнена



программная реализация разработанной методики заполнения нанополостей графен/ОУНТ плёнок кластерами кремния и атомами лития/натрия, проведены численные эксперименты. Постановка задачи, обсуждение и интерпретация результатов осуществлялись совместно с научным руководителем, а также с соавторами опубликованных работ.

**Достоверность полученных результатов** обеспечивается применением широко апробированных и хорошо зарекомендовавших себя квантово-механических и молекулярно-динамических математических моделей, содержащих набор числовых параметров, значения которых выбирались исходя из известных экспериментальных данных, полученных для графена и углеродных нанотрубок, использованием специализированных программных пакетов, протестированных на широком классе кристаллических структур и молекулярных соединений, в том числе углеродных структур, воспроизведением в качестве тестовых расчетов достоверных общепризнанных результатов по оценке энергетических и геометрических характеристик рассматриваемых в работе соединений, известных из литературы, а также широкой апробацией результатов работы, обсуждением результатов работы на международных и всероссийских конференциях.

#### **Положения, выносимые на защиту:**

1. Изменение типа проводимости с полупроводникового на металлический у тонких композитных графен/ОУНТ плёнок с одним слоем вертикально ориентированных закрытых нанотрубок типа «кресло» достигается модификацией нанополостей кластерами кремния (с массовой долей  $\sim 11.5\%$ ) и/или атомами лития (с массовой долей  $\sim 10\%$ ) /натрия (с массовой долей  $\sim 20\%$ ), которая приводит к перетеканию заряда с модифицирующих кластеров/атомов на углеродный каркас, обуславливающему одновременное увеличение энергии Ферми на  $\sim 1$  эВ и появление пика интенсивности у плотности электронных состояний для этого значения энергии. При этом модификация указанных тонких композитных плёнок графен/ОУНТ/кремний атомами лития или натрия обеспечивает уменьшение электрического сопротивления на  $50\%$ ; модификация атомами лития обеспечивает большую удельную ёмкость тонких композитных плёнок графен/ОУНТ и графен/ОУНТ/кремний по сравнению с модификацией атомами натрия на  $47\%$  и  $65\%$ , соответственно.



2. Существует оптимальное соотношение объёма нанополости и количества кластеров кремния  $Si_{16}$ , которое обеспечивает максимальную удельную ёмкость для тонких композитных графен/ОУНТ плёнок с двумя слоями вертикально ориентированных открытых нанотрубок типа «кресло»: 1) каждый атом кремния «захватывает» несколько атомов лития в отличие от атомов углеродного каркаса; 2) при определенном количестве кластеров  $Si_{16}$  их удельная ёмкость становится наибольшей. При этом при одном и том же диаметре трубки увеличение количества кластеров в нанополостях требует пропорционального увеличения объёма нанополостей.

3. Модификация кластерами бора  $B_{12}$  нанополостей графен/ОУНТ тонких плёнок с одним слоем нанотрубок типа «кресло», а также графен/ОУНТ плёнок с вертикально ориентированными закрытыми нанотрубками типа «кресло» и «зигзаг» (с металлическим типом проводимости) позволяет управлять электронным строением, создавая дополнительные электронные состояния вблизи уровня Ферми, и, как следствие, управлять величиной удельной квантовой ёмкости.

4. Модификация кластерами бора  $B_{12}$  нанополостей трубок типа «зигзаг» (с металлическим типом проводимости), входящих в состав графен/ОУНТ плёнки, позволяет управлять электропроводностью плёнки, снижая электрическое сопротивление в 10-50 раз по сравнению с не модифицированной трубкой, что обусловлено появлением дополнительных каналов проводимости вблизи уровня Ферми.

**Публикации.** По теме диссертационной работы опубликовано 9 печатных работ, из них 5 работ в изданиях, индексируемых международными информационно-аналитическими базами данных и системами научного цитирования Web of Science и/или Scopus, 1 работа в издании из перечня ВАК при Минобрнауки России, 3 – в трудах и сборниках всероссийских и международных конференций.

1. **KolosoV D.A.**, Glukhova O.E. Ab Initio Study of Porous Graphene–CNT Silicon Composite for Li-Ion and Na-Ion Batteries // C-Journal of Carbon Research – 2021. – Vol. 7. – P. 57.
2. **KolosoV D.A.**, Glukhova O.E. Boron-Decorated Pillared Graphene as the Basic Element for Supercapacitors: An Ab Initio Study // Applied Sciences. – 2021. – Vol. 11. – Iss. 8. – P. 3496.



3. **Koloso**v D.A., Glukhova O.E. A New Composite Material on the Base of Carbon Nanotubes and Boron Clusters B12 as the Base for High-Performance Supercapacitor Electrodes // C-Journal of Carbon Research. – 2021. – Vol. 7. – P. 26.
4. **Koloso**v D.A., Mitrofanov V.V., Slepchenkov M.M., Glukhova O.E. Thin Graphene–Nanotube Films for Electronic and Photovoltaic Devices: DFTB Modeling // Membranes. – 2020. – Vol. 10. – Iss. 11. – P. 341.
5. **Koloso**v D.A., Glukhova O.E. Theoretical Study of a New Porous 2D Silicon-Filled Composite Based on Graphene and Single-Walled Carbon Nanotubes for Lithium-Ion Batteries // Applied Sciences. – 2020. – Vol. 10. – Iss. 17. – P. 5786.
6. Глухова О.Е., **Колосов** Д.А., Слепченков М.М. Высокое поглощение солнечного света, экстраординарное УФ-поглощение и фотоэлектрические свойства двумерных монослойных материалов на основе различных фаз борофена // Радиотехника. – 2019. – №7(10). – С. 123-130.
7. Glukhova O.E., **Koloso**v D.A., Slepchenkov M.M., Shmygin D.S. Vertical heterostructures based monolayers of dielectric and semiconductor graphene-like 2D materials: Atomic structure, energy stability and electronic properties // Proceedings of SPIE. – 2019. – Vol. 11458 – P. 114580Z.
8. Глухова О.Е., **Колосов** Д.А., Слепченков М.М., Фотоэлектрические свойства двумерных материалов на основе различных фаз борофена // Тезисы докладов XIV Всероссийской конференции молодых ученых «Нанoeлектроника, нанoфотоника и нелинейная физика». – 2019. – С. 119-120.
9. Глухова О.Е., Слепченков М.М., **Колосов** Д.А., Атомное и электронное строение вертикальных гетероструктур на основе монослоев 2D материалов // Тезисы докладов XV Всероссийской конференции молодых ученых «Нанoeлектроника, нанoфотоника и нелинейная физика». – 2020. – С. 253-254.

**Общая оценка диссертации.** Диссертационная работа «Закономерности электронного транспорта и перетекания заряда в тонких плёнках на основе графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками при модификации нанополостей плёнок молекулярными кластерами бора и кремния» является научно-квалификационной работой, содержащей решение актуальной задачи физической электроники по установлению закономерностей протекания тока и переноса заряда в композитных плёнках на основе слоистого графена и вертикально ориентированных ОУНТ типа «кресло» и «зигзаг» субнанометрового диаметра при модификации их атомного строения кластерами кремния и бора, а также вы-



явлению структурных конфигураций модифицированных тонких плёнок графен/ОУНТ, характеризующихся высокой электропроводностью и квантовой емкостью. Диссертация выполнена на высоком уровне с применением современных методов компьютерного моделирования. Основные положения и результаты диссертации в полной мере опубликованы в научных статьях и материалах конференций. Тема и содержание диссертации соответствуют специальности 01.04.04— «Физическая электроника». Диссертация удовлетворяет требованиям пп. 9–11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Диссертация «Закономерности электронного транспорта и перетекания заряда в тонких плёнках на основе графена с вертикально ориентированными углеродными нанотрубками при модификации нанополостей плёнок молекулярными кластерами бора и кремния» Колосова Дмитрия Андреевича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.04 — «Физическая электроника» как удовлетворяющая критериям, установленным «Положением о присуждении ученых степеней» для кандидатских диссертаций.

Заключение принято на расширенном заседании кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского». На заседании присутствовало 16 человек, из них 11 докторов наук и 5 кандидатов наук по профилю диссертации. Результаты голосования: «за» – 16 чел., «против» – нет, воздержались – нет (протокол № 2 от 10 сентября 2021 г).

Председательствующий  
кандидат физико-математических наук, доцент  
доцент кафедры радиотехники и электродинамики  
института физики  
ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»,



410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83  
Тел.: 8(8452)514688  
e-mail: [slepchenkovm@mail.ru](mailto:slepchenkovm@mail.ru)

Слепченков Михаил Михайлович

