

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.392.01,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ  
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ  
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г.  
ЧЕРНЫШЕВСКОГО», МИНОБРНАУКИ РОССИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ  
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение диссертационного совета от 25.11.2022 № 25

О присуждении **Баркову Павлу Валерьевичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Закономерности распределения заряда и электронного транспорта в тонких пленках наносетчатого графена, в том числе модифицированного карбоксильными группами» по специальности 1.3.5. — Физическая электроника принята к защите 16 сентября 2022 года (протокол заседания № 20) диссертационным советом 24.2.392.01, созданным на базе ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского» (ФГБОУ ВО «СГУ имени Н. Г. Чернышевского»), Минобрнауки РФ, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83, приказ Минобрнауки России о создании диссертационного совета от 15.02.2013 №75/нк; приказы об изменении состава совета от 15.12.2015 № 1598/нк-9, от 28.09.2016 № 1180/нк-52, от 15.02.2017 № 116/нк-38, от 26.01.2018 № 92/нк-50, от 17.04.2018 № 431/нк-26, от 23.11.2018 № 301/нк-66, от 24.09.2019 №873/нк-26; приказ об установлении полномочий совета от 03.06.2021 № 561-нк (Приложение 1/597); приказ об изменении состава совета от 15.10.2021 № 1046/нк-33.

Соискатель Барков Павел Валерьевич, «19» ноября 1995 года рождения, в 2019 году окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского» (ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского») с присвоением квалификации магистра по направлению 03.04.03 «Радиофизика». В период подготовки и защиты диссертации с 2019 года и по настоящий момент соискатель обучается в очной аспирантуре ФГБОУ ВО «СГУ имени

Н.Г. Чернышевского» по направлению подготовки 03.06.01 «Физика и астрономия», направленность «Физическая электроника». Работает инженером учебной лаборатории электрорадиотехники кафедры радиотехники и электродинамики Института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского», Минобрнауки РФ.

Диссертация выполнена на кафедре радиотехники и электродинамики Института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского», Минобрнауки РФ.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Глухова Ольга Евгеньевна, ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского», кафедра радиотехники и электродинамики, заведующая кафедрой.

Официальные оппоненты:

1. **Завьялов Дмитрий Викторович**, доктор физико-математических наук (01.04.04), доцент, ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет» (г. Волгоград), кафедра "Физика", заведующий кафедрой;

2. **Бобенко Надежда Георгиевна**, кандидат физико-математических наук (01.04.07), ФГБун Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН (г. Томск), Лаборатория физики нелинейных сред, научный сотрудник дали положительные отзывы на диссертацию.

**Ведущая организация** – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук (г. Уфа) в своем положительном отзыве, подписанном заведующей лабораторией «Физика и механика углеродных наноматериалов» Баимовой Юлией Айдаровной, доктором физико-математических наук (01.04.07), указала, что диссертация Баркова Павла Валерьевича является цельной, логической стройной в рамках рассмотренной проблемы работой, посвященной актуальной теме физической электроники. Несомненный научный интерес представляют найденные в работе способы топологического управления энергетическими параметрами и электропроводностью пленок немодифицированного наносетчатого графена (НСГ) с позиции точечной настройки физических свойств таких пленок в зависимости от их назначения. Выявленные конфигурации пленок НСГ, модифицированного атомами водорода и карбоксильными группами, представляют практический интерес в качестве перспективного материала для электронных устройств с эффектом переключения тока и чувствительного элемента газовых сенсоров. Диссертация П.В. Баркова по актуальности решенных задач, объему проведенных исследований, степени научной новизны и практической значимости результатов удовлетворяет всем требованиям пп. 9-11, 13-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постанов-

лением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а её автор, Барков Павел Валерьевич, достоин присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5. – Физическая электроника.

Соискатель имеет 19 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 12 работ общим объемом 4,93 п.л. (авторский вклад 1,61 п.л.), из них в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК, опубликовано 7 работ, в том числе 6 работ в изданиях, индексируемых международными информационно-аналитическими базами данных и системами научного цитирования Web of Science и/или Scopus.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Rabchinskii M.K., Sysoev V.V., Glukhova O.E., Brzhezinskaya M., Stolyarova D.Yu., Varezchnikov A.S., **Barkov P.V.**, Solomatin M.A., Kirilenko D.A., Pavlov S.I., Baidakova M.V., Shnitov V.V., Struchkov N.S., Nefedov D.Yu., Antonenko A.O., Cai P., Liu Z., Brunkov P.N. Guiding Graphene Derivatization for the On-Chip Multisensor Arrays: From the Synthesis to the Theoretical Background // *Advanced Materials Technologies*. – 2022. – Vol. 7. – Iss. 7. – P. 2101250, [1-16].

2. **Barkov P.V.**, Glukhova O.E. Holey Graphene: Topological Control of Electronic Properties and Electric Conductivity // *Nanomaterials*. – 2021. – Vol. 11. – Iss. 5. – P. 1074, [1-10].

3. **Barkov P.V.**, Glukhova O.E. Carboxylated Graphene Nanoribbons for Highly-Selective Ammonia Gas Sensors: Ab Initio Study // *Chemosensors*. – 2021. – Vol. 9. – Iss. 4. – P. 84, [1-13].

4. **Barkov P.V.**, Glukhova O.E. A new method for determining energetically favorable landing sites of carboxyl groups during the functionalization of graphene nanomesh // *Письма о материалах*. – 2021. – Vol. 11. – Iss. 4. – P. 392-396.

На автореферат диссертации поступило 6 положительных отзывов: из Сколковского института науки и технологий от д.т.н. (05.16.06), профессора РАН Насибулина А.Г.; из Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» от д.ф.-м.н. (02.00.04), доцента Катина К.П.; из Волгоградского государственного университета от д.ф.-м.н. (05.27.01), профессора Запороцковой И. В.; из Саратовского государственного технического университета имени Гагарина Ю.А. от д.т.н. (05.27.01), доцента Сысоева В.В.; из Национального исследовательского университета «МИЭТ» от к.ф.-м.н. (01.04.07) Савельева М.С.; из Саратовского филиала

Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН от к.ф.-м.н. (01.04.03) Фатеева Д.В.

В отзывах на автореферат сделаны замечания: а) об отсутствии обоснования выбора формы отверстий в пленках наносетчатого графена; комментариев относительности устойчивости рассматриваемых структур к влиянию температуры; сравнения рассчитанных электрических сопротивлений модифицированного наносетчатого графена при наличии на его поверхности молекул аммиака с результатами расчета для других типов аналитов; информации о дополнительной проверке предложенного способа размещения карбоксильных групп на краях отверстий наносетчатого графена; пояснений выбора молекулы аммиака при изучении сенсорных свойств модифицированного наносетчатого графена; единиц измерения DOS на графиках и в тексте; сравнения полученных результатов исследования электронного строения наносетчатого графена с известными результатами исследований краевых электронных состояний графеновых «антиточек»; трактовки термина «энергетически выгодная суперъячейка»; б) о необходимости приведения данных по расчету энергии формирования структур модифицированного наносетчатого графена в электрон-вольтах на атом; в) редакционные замечания.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается соответствием проводимых ими научных исследований теме диссертации; их высокой квалификацией в области исследования физических свойств графеновых наноструктур, позволяющей корректно оценить научную и практическую значимость диссертационной работы. Выбор официальных оппонентов также объясняется отсутствием совместных печатных работ с соискателем. Выбор ведущей организации обосновывается наличием в её коллективе большого числа известных специалистов, работающих в направлениях, связанных с тематикой диссертации, а также отсутствием договорных отношений с соискателем. Выбор официальных оппонентов и ведущей организации удовлетворяет критериям, сформулированным в пп. 22 и 24 действующего «Положения о присуждении ученых степеней» от 24 сентября 2013 г. № 842.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

**разработана** оригинальная методика *in silico* модификации наносетчатого графена функциональными группами, основанная на определении энергетически выгодных мест посадки для групп путем анализа распределений избыточного заряда на атомах наносетчатого графена;

**выявлены** закономерности изменения энергетической щели пленок наносетчатого графена с круглыми нанометровыми отверстиями с увеличением ширины шейки (наименьшего расстояния между атомами соседних отверстий) в разных направлениях: при увеличении вдоль направления «зигзаг» листа графена энергетическая щель изменяется скачкообразно в диапазоне от 0.03 до 0.37 эВ, при увеличении вдоль направления «кресло» щель почти не изменяется.

**установлено**, что при модификации отверстий пленок наносетчатого графена атомами водорода полного исчезновения энергетической щели можно добиться в том случае, когда все или большинство краевых атомов отверстия имеют  $sp^3$ -гибридизованные электронные облака.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

**изучены** особенности электронного транспорта и распределения заряда в тонких пленках модифицированного СООН-группами наносетчатого графена с круглыми нанометровыми отверстиями при наличии на поверхности пленки молекул воды и/или аммиака;

применительно к проблематике диссертации результативно (с получением обладающих новизной результатов) использован комплекс современных методов расчета электронно-энергетических и электропроводных характеристик низкоразмерных структур, в частности метод функционала электронной плотности в приближении сильной связи с самосогласованным вычислением заряда, теория квантового транспорта в формализме Ландауэра-Буттикера, метод неравновесных функций Грина-Келдыша, молекулярно-механическая модель универсального силового поля;

**показано**, что в тонких пленках наносетчатого графена с круглыми нанометровыми отверстиями с увеличивающейся шириной шейки возникает анизотропия электропроводности, вызванная неравномерным распределением локальной плотности электронных состояний в разных направлениях транспорта электронов (вдоль направления «зигзаг» и вдоль направления «кресло» листа графена).

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

**установлено**, что тонкие пленки наносетчатого графена с полностью насыщенными водородом связями на краях отверстий (случай  $sp^3$ -гибридизации электронных орбиталей) являются перспективным материалом для устройств с эффектом переключения тока;

**выявлено**, что пленки наносетчатого графена, модифицированного СООН-группами, демонстрируют высокую чувствительность электропроводных характе-

ристик к молекулам воды и аммиака, осаждаемым на его поверхности, что делает их перспективным материалом для использования в качестве селективного элемента газовых сенсоров;

**определены** возможности топологического управления электронно-энергетическими и электропроводными свойствами пленок наносетчатого графена с круглыми нанометровыми отверстиями путем варьирования ширины шейки;

**результаты исследований** использовались при выполнении НИР, поддержанных грантами Минобрнауки FSRR-2020-0004, Российского научного фонда № 21-19-00226 и Президента РФ для поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (проект № МК-2289.2021.1.2).

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

**установлено** качественное и количественное соответствие авторских результатов расчета электрического сопротивления, энергии Ферми и энергетической щели пленок наносетчатого графена, модифицированного карбоксильными группами, с данными натуральных экспериментов;

**использованы** специализированные пакеты программ, верифицированные независимыми квалифицированными специалистами в области моделирования наноструктур, в том числе графена и его модификаций, как в России, так за рубежом;

в качестве тестовых расчетов **воспроизведены** достоверные данные по оценке энергетических и метрических параметров углерод-углеродных и углерод-водородных соединений, входящих в состав рассматриваемых в диссертации наноструктур;

**использованы** современные технологии сбора и обработки информации при проведении численных расчетов и представлении результатов.

**Личный вклад соискателя состоит** в построении атомистических моделей тонких пленок наносетчатого графена, проведении численных экспериментов и обработке полученных результатов. Постановка задачи, обсуждение и интерпретация результатов осуществлялись совместно с научным руководителем. К защите представлены результаты, полученные лично соискателем.

Результаты диссертационной работы рекомендуются к использованию в научно-исследовательских организациях (Институт радиотехники и электроники РАН и его филиалы, Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН (г. Москва), Институт проблем сверхпластичности металлов РАН (г. Уфа), Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН (г. Томск), Объединённый институт ядерных исследований (г. Дубна), Институт биохимической физики им. Н.М. Эма-

нуэля РАН (г. Москва)) при проведении исследований фундаментального и прикладного характера в области электроники низкоразмерных структур, а также в высших учебных заведениях при подготовке специалистов в области физической электроники (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова; Национальный исследовательский университет «МИЭТ», г. Зеленоград; Башкирский государственный университет, г. Уфа; Казанский (Приволжский) федеральный университет; Волгоградский государственный технический университет; Волгоградский государственный университет; Саратовский национальный исследовательский государственный имени Н.Г. Чернышевского; Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А. и др.).

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания: 1) о необходимости пояснения наблюдаемого эффекта скачкообразного изменения энергетической щели и электропроводности пленок наносетчатого графена только лишь в одном направлении увеличения ширины шейки; 2) о причинах неоднородности распределения локальной плотности электронных состояний по атомам суперъячейки наносетчатого графена при увеличении ширины шейки в различных направлениях; 3) о дополнительном пояснении влияния точности вычислительного метода на полученные результаты расчета; 4) о необходимости пояснений, насколько сильно изменятся результаты проведенных расчетов энергетических и электропроводных параметров наносетчатого графена с увеличением или уменьшением диаметра отверстия.

Соискатель Барков П.В. ответил на замечания, содержащиеся в отзывах ведущей организации и официальных оппонентов, и на задаваемые ему в ходе заседания вопросы и дал необходимые пояснения: 1) о согласовании проведенных в диссертации расчетов электропроводности с полученными ранее результатами других авторов; 2) о трактовке локальной плотности электронных состояний; 3) о корректности использования понятия анизотропии электропроводности применительно к рассматриваемым пленкам наносетчатого графена с увеличивающейся шириной шейки в разных направлениях; 4) о том, какой именно эксперимент проводился для апробации результатов расчета электропроводных параметров модифицированного карбоксильными группами наносетчатого графена; 5) о физической трактовке полученных результатов расчетов электропроводности пленок наносетчатого графена, модифицированного атомами водорода и модифицированного карбоксильными группами при наличии молекул воды и аммиака.

Диссертация П.В. Баркова содержит решение актуальной задачи физической электроники по установлению закономерностей квантового транспорта электронов и распределения заряда в тонких пленках наносетчатого графена с круглыми нанометровыми отверстиями при различных модификациях атомной структуры пленок. Содержание диссертации удовлетворяет требованиям пп. 9-11, 13, 14 действующего «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждено Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5. – Физическая электроника.

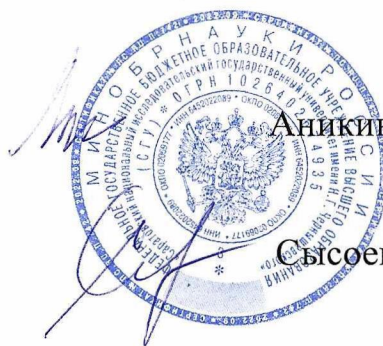
На заседании 25 ноября 2022 года диссертационный совет принял решение присудить Баркову П.В. ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5. – Физическая электроника.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 22 человек (21 человек находились в месте проведения заседания, 1 человек участвовали в заседании совета в удаленном интерактивном режиме), из них 5 докторов по специальности 1.3.5. – Физическая электроника, участвовавших в заседании, из 30 человек, входящих в состав совета: проголосовал: за – 22, против – нет, воздержавшихся – нет.

Председатель  
диссертационного совета

Ученый секретарь  
диссертационного совета

25 ноября 2022 г.



Аникин Валерий Михайлович

Сысоев Илья Вячеславович