

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 17.12.2021 № 11

О присуждении **Колосову Дмитрию Андреевичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

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» по специальности 1.3.5. — Физическая электроника принята к защите 7 октября 2021 года (протокол заседания № 5) 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 Колосов Дмитрий Андреевич, 5 августа 1993 года рождения, в 2017 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 2021 году освоил программу подготовки научно-

педагогических кадров 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 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 нанотехнологий микроэлектроники Российской академии наук (г. Москва) в своем положительном отзыве, подписанном Зеновой Еленой Валентиновной, доктором технических наук (05.09.02), указала, что диссертация Колосова Дмитрия Андреевича представляет собой законченное исследование, которое вносит важный вклад в развитие электроники на углеродных структурах. Результаты проведенных исследований открывают возможность топологического управления электронным строением подобных композитных плёнок, варьирую типом и массовой долей модифицирующих кластеров. Диссертация Д.А. Колосова 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 постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а её автор, Колосов Дмитрий Андреевич, достоин присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5. – Физическая электроника.

Соискатель имеет 17 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 9 работ общим объемом 4,125 п.л. (авторский вклад 1,708 п.л.), из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 6 работ. Список публикаций включает 5 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. 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, [1-9].

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, [1-7].

3. Kolosov 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, [1-8].

4. Kolosov 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, [1-10].

На автореферат диссертации поступило 7 положительных отзывов: из Института проблем сверхпластичности металлов РАН от д.ф.-м.н. (01.04.07), профессора РАН Баимовой Ю. А.; из Национального исследовательского университета «МИЭТ» от д.ф.-м.н. (05.27.01), профессора Неволлина В. К.; из Волгоградского государственного университета от д.ф.-м.н. (05.27.01), профессора Запороцковой И. В.; из Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» от к.ф.-м.н. (01.04.07), доцента Катина К. П.; из Национального исследовательского университета «МИЭТ» от к.ф.-м.н. (01.04.07) Савельева М. С.; из Саратовского государственного технического университета имени Гагарина Ю. А. от д.т.н. (05.27.01), доцента Сыроева В. В.; 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 сделаны замечания об отсутствии в автореферате: комментариев относительно экспериментального получения рассматриваемых композитных плёнок графен/ОУНТ (одностенные углеродные нанотрубки) с кремнием и бором; сведений о влиянии металлической подложки токоотвода на свойства электродного материала на основе плёнок графен/ОУНТ; пояснений характера расположения кла-

стеров кремния и бора на поверхности плёнок графен/ОУНТ; сравнения полученных численных результатов с натурным экспериментом; обоснований выбора хиральности трубок и причины большей равновесности трубок (6,6) в сравнении с трубками (5,5) и (9,0); описания границы применимости модели, используемой в работе; рассмотрения случая наличия  $sp^3$ -дефектов в структуре.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается соответствием проводимых ими исследований теме диссертации; их высокой квалификацией в области исследования низкоразмерных углеродных структур, 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:

для выявления закономерностей влияния атомов лития и натрия на электрофизические свойства графен/ОУНТ тонких плёнок **разработан** алгоритм заполнения в численном эксперименте нанополостей композитных плёнок, позволяющий получить атомистические модели графен-нанотрубных структур с энергетически выгодным распределением наполнителей по углеродному каркасу;

**установлено**, что при наличии кластеров кремния  $Si_{16}$  наблюдается эффект снижения электрического сопротивления графен/ОУНТ композитных плёнок с вертикально ориентированными нанотрубками с закрытыми концами на два порядка по сравнению с немодифицированными кремнием плёнками за счет переноса заряда с кластера кремния на углеродный каркас, а также сдвига энергии Ферми в область разрешенных состояний;

**доказано** существование закономерностей в процессе управления электронным строением и величиной удельной квантовой ёмкости 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) путём модификации их нанополостей кластерами

бора  $B_{12}$ , приводящей к появлению дополнительных электронных состояний вблизи уровня Ферми.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

**изучены** особенности квантового транспорта электронов и переноса заряда в тонких композитных плёнках графен/ОУНТ с вертикально ориентированными нанотрубками с открытыми и закрытыми концами при модификации атомного строения плёнок кластерами кремния  $Si_{16}$  и бора  $B_{12}$  с различной массовой долей;

применительно к проблематике диссертации результативно (с получением обладающих новизной результатов) использован комплекс современных методов численного моделирования атомного строения и электрофизических характеристик низкоразмерных структур, в частности теория функционала плотности, квантовая молекулярная динамика Кара-Паринелло, эмпирическая молекулярная динамика с реактивным силовым полем ReaxFF, метод неравновесных функций Грина-Келдыша, формализм Ландауэра-Буттикера;

**показано**, что модифицирование кластерами бора  $B_{12}$  способствует, с одной стороны, уменьшению электрического сопротивления композитных плёнок графен/ОУНТ за счет увеличения плотности электронных состояний вблизи энергии Ферми и переноса заряда с кластеров бора на углеродных каркас композита, с другой стороны, способствует существенному росту удельной квантовой ёмкости плёнок;

**выявлен** эффект увеличения квантовой ёмкости и роста электропроводности у трубок  $(n,0)$  ( $n$  – кратно трем) полупроводникового типа проводимости, где при достижении 17,68% массовой доли бора квантовая ёмкость повысилась в 40 раз в сравнении с чистой трубкой.

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

**установлено**, что с позиции улучшения удельной ёмкости модификация нанополостей композитных плёнок графен/ОУНТ атомами натрия является более выгодной по сравнению с модификацией атомами лития; модификация атомами натрия позволяет добиться десятикратного увеличения удельной ёмкости по сравнению с удельной ёмкостью графита;

**выявлено**, что существует оптимальное соотношение объёма нанополости и количества кластеров кремния  $Si_{16}$ , при котором обеспечивается максимальная удельная ёмкость для тонких композитных графен/ОУНТ плёнок с двумя слоями вертикально ориентированных нанотрубок типа «кресло» с открытыми концами;

при одном и том же диаметре нанотрубки увеличение количества модифицирующих кластеров в нанополостях требует пропорционального увеличения объема нанополостей плёнок;

**определены** возможности топологического управления электронным строением графен/ОУНТ композитных плёнок, варьируя типом и массовой долей модифицирующих кластеров;

**результаты исследований** использовались при выполнении НИР, поддержанных грантами РФФИ (№ 19-32-90160, №18-32-010030), а также грантов Президента РФ для поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (проекты № МК-2289.2021.1.2 и МК-2373.2019.2).

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

**использованы** квантово-механические и молекулярно-динамические математические модели, содержащие набор числовых параметров, значения которых выбирались исходя из надежных экспериментальных данных, полученных для графена и углеродных нанотрубок;

**использованы** специализированные программные пакеты, верифицированные независимыми квалифицированными исследователями как в России, так за рубежом при изучении широкого класса кристаллических структур и молекулярных соединений, в том числе углеродных структур;

в качестве тестовых расчетов **воспроизведены** общепризнанные результаты по оценке энергетических и геометрических характеристик рассматриваемых в работе соединений, известные из литературы;

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

**Личный вклад соискателя состоит** в построении атомистических моделей композитных структур графен/ОУНТ, в программной реализации разработанного алгоритма заполнения нанополостей графен/ОУНТ плёнок кластерами кремния и атомами лития/натрия, а также в проведении численных экспериментов. 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 нанотехнологий микроэлектроники РАН, г. Москва; Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова РАН, г. Москва, его филиалы в Саратове и Фрязино; Институт физики прочности и

материаловедения Сибирского отделения РАН, г. Томск; Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа; Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН, г. Москва; Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна), занимающихся исследованиями в области электроники на низкоразмерных структурах, а также в высших учебных заведениях при подготовке специалистов в области физической наноэлектроники (Национальный исследовательский университет «МИЭТ», г. Зеленоград; Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова; Саратовский национальный исследовательский государственный имени Н.Г. Чернышевского; Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А., Казанский (Приволжский) федеральный университет; Волгоградский государственный технический университет; Волгоградский государственный университет; Башкирский государственный университет, г. Уфа).

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.

В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания: 1) о необходимости развернутого пояснения, каким образом осуществлялась проверка адекватности используемых в работе моделей реальным плёнкам на основе графена и нанотрубок; 2) о необходимости более четкого определения понятия квантовой ёмкости и её свойств; 3) о необходимости пояснения, каким образом в используемых моделях учитывалось влияние температуры; 4) о необходимости включения информации о стабильности исследуемой структуры композитных плёнок с примесными атомами лития и натрия; 5) о необходимости пояснения относительно существенности выбора типа нанотрубки при модификации плёнок графен/ОУНТ кластерами бора.

Соискатель Колосов Д.А. ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы и дал необходимые пояснения: 1) пояснил, что проводилось сравнение результатов расчета удельной ёмкости тонких плёнок графен/ОУНТ с результатами измерений удельной ёмкости, полученными американскими учёными для структур колонного графена, по результатам которого установлено, что рассчитанные значения ёмкости рассматриваемых плёнок довольно близки к экспериментальным значениям (разница в пределах 5%); 2) уточнил, что квантовая ёмкость дает количественное описание плотности электронных состояний на уровне Ферми, и что в случае рас-

смаатриваемых в работе композитных плёнок эта характеристика отражает влияние квантовых эффектов, в частности принципа запрета Паули, на зарядные характеристики суперконденсаторов; 3) пояснил, что при расчетах электронного транспорта температура учитывалась путем использования функции теплового уширения уровней энергии в формуле для расчета электропроводности, а в процессе нахождения равновесной конфигурации супер-ячеек пленок температура учитывалась путем задания функции Ферми-Дирака при нахождении функции электронной плотности; 4) привёл данные о том, что для композитных плёнок графен/ОУНТ, модифицированных кластерами кремния  $Si_{16}$ , энергия связи при отрыве атома лития составила -1.68 эВ/атом, при отрыве атома натрия -1.33 эВ/атом, что, принимая во внимание отрицательную величину энергии связи, позволяет судить об энергетической стабильности таких композитных структур; 5) пояснил, что независимо от типа нанотрубки (zigzag или armchair) в составе композитной плёнки графен/ОУНТ при добавлении кластеров кремния наблюдалось исчезновение энергетической щели в электронной структуре плёнок.

Диссертация Д. А. Колосова содержит решение актуальной задачи физической электроники по установлению закономерностей влияния кластеров кремния и бора на электронные и электрофизические свойства графен/ОУНТ композитных тонких пленок.

На заседании 17 декабря 2021 года диссертационный совет принял решение присудить Колосову Д.А. ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5. – Физическая электроника.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 23 человек (20 человек находились в месте проведения заседания, 3 человека участвовали в заседании совета в удаленном интерактивном режиме), из них 7 докторов по специальности 1.3.5. – Физическая электроника, участвовавших в заседании, из 30 человек, входящих в состав совета: проголосовал: за – 23, против – нет, воздержавшихся – нет.

Председатель  
диссертационного совета

Ученый секретарь  
диссертационного совета



Аникин Валерий Михайлович

Сысоев Илья Вячеславович

17 декабря 2021 г.