

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.243.01 НА БАЗЕ
ФГБОУ ВО «САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ Н.Г. ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 6.10.2016, № 66

О присуждении **Шунаеву Владиславу Викторовичу**, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Электронные свойства и энергетические параметры модифицированных графен-фуллереновых комплексов с позиции применения в нанoeлектронике» по специальности 05.27.01 – Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и нанoeлектроника, приборы на квантовых эффектах принята к защите 27.06.2016 г., протокол № 62 диссертационным советом Д 212.243.01 на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Министерство образования и науки РФ. Адрес: 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83 совет утвержден приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 15.02.2013, № 75-нк.

Соискатель **Шунаев Владислав Викторович** 1989 года рождения, в 2012 году с отличием окончил ФГБОУ ВО «Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», работает инженером на кафедре радиотехники и электродинамики физического факультета в ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского». В 2016 году соискатель освоил программу подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре на кафедре радиотехники и электродинамики ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Министерство образования и науки РФ.

Диссертация выполнена на кафедре радиотехники и электродинамики физического факультета ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Министерство образования и науки РФ.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Глухова Ольга Евгеньевна, ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», физический факультет, заведующий кафедрой радиотехники и электродинамики.

Официальные оппоненты:

1. **Нефедов Игорь Сергеевич**, доктор физико-математических наук, с.н.с., научный сотрудник Университета Аалто, Финляндия

2. **Катков Всеволод Леонидович**, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – **Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники»** в своем положительном заключении, составленном Неволным Владимиром Кирилловичем, профессором, д.ф-м.н., г.н.с. НОЦ «Зондовая микроскопия и нанотехнология» МИЭТ) и подписанном проректором по научной работе МИЭТ д.т.н., профессором Гавриловым Сергеем Александровичем, указала, что диссертационная работа Шунаева В.В. выполнена на высоком уровне, вносит весомый вклад в развитие углеродной наноэлектроники и является законченной научно-квалификационной работой, которая соответствует выбранной специальности и отвечает критериям пп. 9-14 «Положения о порядке присвоения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.27.01 – Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах.

Соискатель имеет 20 опубликованных работ, в том числе **14 работ по теме диссертации в изданиях, включенных в перечень, рекомендуемых ВАК РФ**, а также 8 тезисов докладов на российских и международных конференциях. Наиболее значимыми работами являются:

1. Глухова О.Е., Савостьянов Г.В., Слепченков М.М., **Шунаев В.В.** Новые графеновые нанотехнологии манипулирования молекулярными объектами // Письма в ЖТФ. – 2016. – №42 – С. 56–63.
2. **Shunaev V.V.**, Glukhova O.E. The Topology Influence on the Process of Graphene Functionalization by Epoxy and Hydroxyl Groups // The Journal of Physical Chemistry C. – 2016. – Vol. 120 (7). – P. 4145–4149.
3. **Shunaev V.V.**, Savostyanov G.V., Slepchenkov M.M. and Glukhova O.E. Phenomenon of the current occurrence during the motion of the C60 fullerene in substrate-supported graphene // RSC Advanced. – 2015. – Vol. 5. – P. 86337–86346.
4. Глухова О.Е., Слепченков М.М., **Шунаев В.В.** Влияние деформации прогиба на атомное и электронное строение графеновой наночастицы. // Физика твердого тела. – 2014. – № 56. – С.1857–1862.

На диссертацию и автореферат поступило 7 положительных отзывов: из Башкирского государственного университета, г. Уфа, от д.ф.-м.н. профессора Бахтизина Р.З., из Волгоградского государственного университета, от д.ф.-м.н. профессора Запороцковой И.В., из Института проблем сверхпластичности металлов РАН, г. Уфа, от к.ф.-м.н. Баимовой Ю.А., из Словацкой Академии Наук, от PhD Пинчака Р., из Института высокопроизводительных вычислений (Сингапур) от PhD Соркина В., из Клауд Фармацевтикалз (Калифорния, США) от PhD Прытковой Т.Р., из АО «НПП «Алмаз», г. Саратов, от к.ф.-м.н. Шестеркина В.И.

В отзывах на автореферат содержатся замечания: а) относительно недостаточного освещения энергетических потенциалов, использованных для моделирования методом молекулярной динамики подложки графена и моделирования иона лития; б) об отсутствии численных данных о повышении точности метода определения полной энергии наноструктур за счет введения поправки второго порядка в уравнении (1) для полной энергии системы; в) об отсутствии в работе термина «функционализация» при добавлении атомов кислорода к поверхности графена; г) не

объяснено, почему автор использовал пакеты KVAZAR и RING вместо широко апробированных пакетов типа VASP, Gaussian, Gromacs, LAMMPS.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что оба оппонента являются признанными в России и за рубежом высококвалифицированными специалистами в области теоретических и экспериментальных исследований физических свойств углеродных наноструктур, в том числе графена, и разработке теоретических моделей и экспериментальных прототипов наноустройств на основе этих материалов, а ведущая организация давно зарекомендовала себя в России как авторитетный научно-исследовательский центр, эффективно работающий в области нанотехнологий с использованием современных инструментов исследования и сотрудничающей с крупными промышленными предприятиями РФ. Выбор официальных оппонентов объясняется, кроме того, отсутствием совместных печатных работ с соискателем по теме диссертации. Выбор ведущей организации обосновывается также отсутствием договорных отношений с соискателем.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана новая методика формирования локального свойства поверхности графена модификацией атомарным кислородом и ОН-группами участков атомной сетки с максимальной кривизной. Кривизна сетки, как показано в диссертации, может создаваться, в частности, в результате локального прогиба иглой атомно-силового микроскопа;

предложен способ контроля перемещения фуллерена по графену в фуллерен-графеновом комплексе, который включает модификацию самого графена за счет изменения гофрированности подложки, сообщения фуллерену заряда (инкапсулированием в его полость иона калия или другого элемента) и наложения внешнего электрического поля;

доказано, что прогиб графена снижает потенциал ионизации, в предельном случае – на 0.1 эВ, что приводит к улучшению его эмиссионной способности;

обнаружено, что присоединение кислорода к графену приводит к появлению энергетической щели, которая увеличивается при увеличении концентрации кислорода.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

установлены энергетический барьер для модификации монослойного графена атомарным кислородом и ОН-группами в случае плоской и криволинейной (с различной степенью кривизны) атомной сетки. Определен энергетический профиль барьера для модификации бислойного графена атомарным кислородом и ОН-группами. Впервые получены энергии связи атомов графена с кислородом и ОН-группами;

установлены электронные свойства графена, модифицированного атомарным кислородом и ОН-группами: при концентрации кислорода 1.8% в электронном спектре графена открывается энергетическая щель 0.05 эВ, которая увеличивается при увеличении концентрации кислорода.

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

раскрыты условия возникновения нового физического явления – электронного трансфера (переноса электронного заряда) от графена к фуллерену C₆₀. Явление электронного трансфера, который может меняться вследствие движения самого фуллерена и тем самым индуцировать электрический ток, может стать одним из физических принципов работы устройств фотовольтаики и вертикальных графеновых транзисторов;

предложена новая эффективная методика модификации графена атомарным кислородом и ОН-группами, которая позволит эффективно создавать паттерны интегральных схем на основе графена;

установлено явление перескока фуллерена в клетке внешней икосаэдрической оболочки, которое может быть использовано в современных технологиях, например, при локальном определении температуры по увеличению скорости перескоков.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

теория построена на известных проверяемых данных и согласуется и с опубликованными теоретическими и экспериментальными результатами по теме диссертации;

идея базируется на обобщении передового опыта и современных результатов в области твердотельной и наноэлектроники;

использованы математические процедуры, методы и подходы, апробированные для различных моделей и хорошо зарекомендовавшие себя при проведении научных исследований в твердотельной электронике и при изучении физических свойств наноструктур;

установлено количественное совпадение авторских результатов при использовании метода REBO, а также методов сильной связи, а также их качественное совпадение с результатами, представленными в независимых источниках по данной тематике, в тех случаях, когда такое сравнения является обоснованным;

использованы современные методики сбора и обработки информации.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии в постановке задач, разработке методов их решения, проведении численных расчетов, интерпретации результатов, апробации результатов исследования и подготовке основных публикации по теме работы.

Полученные Шунаевым В.В. результаты рекомендуется использовать при создании устройств наноэлектроники в АО «НПП «Алмаз» (г. Саратов) в НОЦ «Зондовая микроскопия и нанотехнологии», МИЭТ (г. Зеленоград), Институте проблем сверхпластичности металлов РАН, (г. Уфа), Институт радиотехники и электроники РАН (г. Москва), а также в учебном процессе вузов, ведущих подготовку специалистов в области наноэлектроники (Саратовский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Объединенный институт ядерных исследований (г. Дубна), Башкирский государственный университет (г. Уфа), Волгоградский государственный университет.

На заседании **6.10.2016 г.** диссертационный совет Д 212.243.01 принял решение присудить **Шунаеву В.В.** ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве **22** человек, из них **8** докторов наук по специальности 05.27.01 – Твердотельная

электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах, участвовавших в заседании, из 29 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – **22**, против – **нет**, недействительных бюллетеней – **нет**.

Председатель диссертационного совета

Усанов Дмитрий Александрович

Ученый секретарь диссертационного совета

Аникин Валерий Михайлович

6 октября 2016 г.

