

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.243.01 НА БАЗЕ
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Саратовский государственный университет
имени Н.Г. Чернышевского» (Министерство образования и науки РФ)
по диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 14.04.2016 г., № 58

О присуждении Анিকেеву Никите Андреевичу, гражданину РФ,
ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация на тему «Модифицированный пиролизированный полиакрилонитрил в твердотельной электронике: особенности строения и свойств» по специальности 05.27.01 «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах» принята к защите 11.01.2016, протокол № 54, диссертационным советом Д 212.243.01 на базе ФГБОУ ВО «Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского» (Министерство образования и науки РФ), 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83; приказ Минобрнауки РФ о создании совета от 15.02.2013, № 75-нк, приказ об изменении состава совета от 15.12.2015, № 598-нк.

Соискатель Анিকেев Никита Андреевич, 1989 года рождения, в 2007 году окончил ФГБОУ ВПО «Волгоградский государственный университет». В 2015 г. окончил экстерном аспирантуру ФГБОУ ВПО «Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского» по специальности 05.27.01 «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах». Работает ассистентом кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет» (Министерство образования и науки РФ).

Диссертация выполнена в ФГАОУ ВО Волгоградский государственный университет на кафедре судебной экспертизы и физического материаловедения.

Научный руководитель (консультант) – доктор физико-математических наук, профессор Запороцкова Ирина Владимировна, Волгоградский государственный университет, директор института приоритетных технологий.

Официальные оппоненты:

Козлов Владимир Валентинович, доктор технических наук, ведущий научный сотрудник ФГБУН Институт нефтехимического синтеза им А. В. Топчиева РАН (ИНХС РАН);

Белоненко Михаил Борисович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры информатики и математики ЧОУ ВО «Волгоградский институт бизнеса»,

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация ФГБОУ ВО «Астраханский государственный университет», г. Астрахань, в своем положительном заключении, подписанном директором – научным руководителем Центра функциональных магнитных материалов Астраханского государственного университета доктором физико-математических наук, профессором, Карпасюком Владимиром Корнильевичем и заведующим совместной лабораторией физики конденсированного состояния и новых методов исследований в материаловедении АГУ-ИФТТ РАН, кандидатом физико-математических наук Меркуловым Денисом Ювовинтальевичем, указала, что « диссертация Аникеева Н.А. представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, в которой содержится решение задачи, имеющей существенное значение для создания научных основ и физических принципов разработки твердотельных приборов, элементов изделий наноэлектроники на основе модифицированного пиролизованного полиакрилонитрила. Диссертация соответствует критериям, установленным «Положением о присуждении ученых степеней» для кандидатских диссертаций»... Аникеев Н.А. достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.27.01 «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах»».

Соискатель имеет 16 опубликованных работ, все по теме диссертации; работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях – 4. Наиболее значимые работы:

1. Zaporotskova, I.V. Theoretical studies of the structure of the metal – carbon composites on the base of acryle – nitrile nanopolimer / I. V. Zaporotskova, L.

V. Kojitov, N. A. Anikeev, O.A. Davletova, A.V. Popkova // Journal of nano- and electronic physics, 2014. – Vol. 6. – № 3, P. (03035-1) – (03035-3).

2. Запороцкова, И. В. Исследование процесса гидрогенизации однослойного и двухслойного пиролизованного полиакрилонитрила / И. В. Запороцкова, Л. В. Кожитов, Н. А. Аникеев, А. В. Попкова // Известия вузов. Материалы электронной техники. – 2013. – № 3. – С.34 – 38.

3. Запороцкова, И. В. Квантово – химические расчеты процессов адсорбции простых газофазных молекул на поверхности пиролизованного полиакрилонитрила / И. В. Запороцкова, Л. В. Кожитов, Н. А. Аникеев, А. В. Попкова // Известия Юго-Западного государственного ун-та. Сер. физика и химия. – 2013. – № 1. – С . 8 – 16.

4. Запороцкова, И. В. Металлоуглеродные нанокompозиты на основе пиролизованного полиакрилонитрила / И. В. Запороцкова, Л. В. Кожитов, Н. А. Аникеев, О. А. Давлетова, Д. Г. Муратов, А. В. Попкова, Е. В. Якушко // Изв. вузов. Материалы электронной техники. – 2014. – № 2(66). – С. 134 – 142.

Во всех работах соискатель принимал непосредственное участие на этапах получения результатов, постановки задач и интерпретации результатов исследования.

На автореферат поступило 6 положительных отзывов: из АО НПП «ИСТОК» им. А. И. Шокина от к.т.н. с.н.с. М. Н. Хабачева; из Института общей и неорганической химии им. Н. С. Курнакова РАН от д.х.н., профессора, в.н.с. лаборатории квантовой химии П.Н. Дьячкова; из АО «Научно-исследовательский физико-химический институт имени Л. Я. Карпова», от к.т.н. с.н.с. лаборатории коррозии и электрохимии Т. Т. Кондратенко; из Волгоградского архитектурно-строительного университета, от д.ф.-м.н., профессора, заведующего кафедрой физики А. И. Бурханова; из ООО «ЛУКОЙЛ–Волгограднефтепереработка» от к.т.н. Н. И. Тепловой; из Волгоградского государственного технического университета от д.т.н. профессора, д.т.н. Н. А. Адаменко.

В отзывах содержатся замечания об отсутствии в автореферате: а) магнитных характеристик модифицированного атомами d-элементов (Fe, Co, Ni, Cu) пиролизованного полиакрилонитрила (ППАН); б) «рекомендаций относительно постановки новых экспериментов, использующих данные моделирования»; в) «объяснения решения проблемы дегазации в случае использования полимера в качестве чувствительного элемента»; г) подробного «сопоставления полученных теоретических результатов и экспериментальных данных».

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается соответствием уровня квалификации оппонентов и сотрудников ведущей организации требованиям п. 22 «Положения о присуждении ученых степеней», что находит отражение в содержании опубликованных ими работ в рецензируемых изданиях за последние 5 лет.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработаны физико-математические модели нанокompозитов на базе *монослойного* пиролизованного полиакрилонитрила с включением атомов металлов и газов;

предложено использование двухслойного пиролизованного полиакрилонитрила с внедренной в межплоскостное пространство кубической кристаллической решеткой, выполненной атомами железа и меди в качестве продольных проводящих слоевых каналов;

доказана возможность образования молекулы водорода в межслоевом пространстве пиролизованного полиакрилонитрила при объединении последовательно внедренных атомов водорода.

введено понятие «парного соединения» - соединения двух атомов переходных металлов в молекулу.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

Доказана возможность физической адсорбции молекулы углекислого газа плоскостью пиролизованного полиакрилонитрила, а так же возможность обратимости данной реакции, так же установлено наиболее возможное расположение атомов металлов в плоскости монослоя пиролизованного полиакрилонитрила и установлено, что введение атомов металлов в кластер изменяет проводящее состояние системы (качественное сравнение изменения значения ширины запрещенной зоны чистого и модифицированного пиролизованного полиакрилонитрила) ППАН – атом металла, что позволяет целенаправленно изменять физико-химические свойства рассматриваемого композита.

Применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использован метод функционала плотности.

Выявлены особенности процесса взаимодействия молекул газа с поверхностью пиролизованного полиакрилонитрила.

Изучены факторы, влияющие на поверхностное взаимодействие молекул газов с пиролизированным полиакрилонитрилом, а также основные факторы изменения значения ширины запрещенной зоны при использовании различных модификаторов.

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

определены основные тенденции изменения значения ширины запрещенной зоны модифицированного пиролизированного полиакрилонитрила, в зависимости от модифицирующего элемента и его расположения в углеродной матрице полимера.

указаны наиболее возможные расположения атомов металлов в плоскости монослоя пиролизированного полиакрилонитрила и установлено, что введение атомов металлов в кластер изменяет проводящее состояние системы (качественное сравнение изменения значения ширины запрещенной зоны чистого и модифицированного пиролизированного полиакрилонитрила) ППАН – атом металла, что позволяет целенаправленно изменять физико-химические свойства рассматриваемого композита.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

при получении теоретических результатов применена теория функционала плотности, широко используемая в вычислительной физике и вычислительной химии;

использованные данные для построения исходных моделей кластеров пиролизированного полиакрилонитрила (длина связи между атомами в кластере) согласуются с результатами исследований, проведенных другими авторами;

при сопоставлении экспериментальных результатов и результатов компьютерного моделирования предложенная модель монослоя нанокompозита на основе ППАН соответствует реальным материалам: ширина запрещенной зоны, рассчитанная на основе модели монослоя, в значительной степени совпадает с величиной энергии активации проводимости металлоуглеродных материалов на основе ППАН, синтезированных в интервале температур 600-800 °С.

Личный вклад соискателя состоит в построении физико-математических моделей модифицированного пиролизированного полиакрилонитрила, проведении квантово-химических расчетов, проработке и анализе литературы по теме диссертации, написании статей.

Результаты, полученные в диссертации, рекомендуются для использования в Национальном исследовательском технологическом университете «МИСиС», Институте радиотехники и электроники имени В.А. Котельникова РАН, Астраханском государственном университете, Волгоградском государственном университете, в других научно-производственных организациях, в которых изучаются физико-химические свойства органических полупроводников в целях формирования новых функциональных сред наноэлектроники.

В диссертации содержится решение актуальной задачи по разработке твердотельных приборов, элементов изделий наноэлектроники на основе модифицированного пиролизованного полиакрилонитрила. Диссертация удовлетворяет требованиям п. 9 действующего «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.27.01 «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах».

На заседании диссертационный совет принял решение присудить Аникееву Никите Андреевичу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 05.27.01 «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах».

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 23 человек, из них 8 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации (05.27.01 «Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах»), участвовавших в заседании, из 30 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за 22, против – нет, недействительных бюллетеней – 1.

Председатель диссертационного совета

Усанов Дмитрий Александрович

Ученый секретарь диссертационного совета

Аникин Валерий Михайлович

14 апреля 2016 г.