

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о диссертационной работе Колесниченко Павла Андреевича
«Управление электронным транспортом в квази-2D слоистых ZnO- и CuO-
пленках модификацией поверхности», представленной на соискание
ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.3.5. – Физическая электроника

Диссертационная работа Колесниченко П.А. посвящена изучению методами атомистического моделирования физических явлений электронного транспорта и переноса заряда в квази-2D слоистых пленках ZnO- и CuO при модификации поверхности пленок.

Цель работы заключалась в выявлении закономерностей изменения электропроводности квази-2D структур оксидов металлов ZnO и CuO при различных вариантах модификации их поверхности: адсорбция молекул газов, образование и удаление точечных дефектов в поверхностном слое решетки. Тема работы является **актуальной**, поскольку квази-2D структуры оксидов металлов представляют собой один из наиболее перспективных классов функциональных материалов для создания современных устройств физической электроники, в частности для сенсоров, принцип работы которых основан на изменении электропроводности тонких плёнок при модификации их поверхности. Понимание физических механизмов, обуславливающих изменение электропроводности при модификации поверхности плёнок, открывает возможность управления их электропроводными свойствами, что важно для последующего использования этих материалов в электронных устройствах.

Для достижения поставленной цели П.А. Колесниченко грамотно использовал комплекс квантово-механических методов компьютерного моделирования, включая метод функционала электронной плотности в приближении сильной связи с самосогласованным вычислением заряда (SCC-DFTB), теорию квантового транспорта в формализме Ландауэра-Буттикера и физико-математический аппарат метода неравновесных функций Грина-Келдыша, метод функционала плотности (DFT).

В диссертации П.А. Колесниченко получен ряд новых научных результатов, расширяющих имеющиеся представления об особенностях физических явлениях в квази-2D структурах оксидов металлов ZnO и CuO. В частности, раскрыт физический механизм уменьшения сопротивления квази-2D слоистой пленки материала ZnO с кристаллографическим срезом (11 $\bar{2}$ 0) при физической адсорбции аналитов (спиртов, кетонов) на её поверхности. Выявлен физический механизм управления электропроводностью квази-2D слоистых пленок CuO с кристаллографическим срезом (111) наличием на её поверхности кислородных вакансий (удалённого решётчатого кислорода), адсорбированного атомарного и молекулярного кислорода. Проведено усовершенствование параметризации Слэйтера–Костера метода SCC-DFTB для атомов Cu, O, C, H, обеспечивающей корректное воспроизведение геометрических параметров кристаллических решёток оксидов меди в процессе поиска глобального минимума полной энергии. Разработана методика послойного наращивания

толщины квази-2D слоистой пленки ZnO ($11\bar{2}0$), обеспечивающая согласование электронно-энергетических характеристик атомистической модели с параметрами объёмного кристалла.

Полученные результаты имеют несомненную **научную и практическую значимость**. Разработанная параметризация Слэйтера–Костера для материала CuO открывает возможность моделирования многоатомных суперъячеек оксида меди методом SCC-DFTB. Установленные закономерности электронного отклика материала ZnO ($11\bar{2}0$) на органические молекулы создают теоретическую основу для проектирования газовых сенсоров для экологического мониторинга, медицинской диагностики и промышленной безопасности. Полученные данные об отклике электропроводности CuO (111) на кислородные дефекты важны для оптимизации рабочих характеристик газовых сенсоров на основе оксида меди.

Результаты диссертационной работы П.А. Колесниченко прошли должную апробацию на международных/всероссийских научных конференциях и в достаточной мере опубликованы в ведущих рецензируемых научных изданиях, индексируемых зарубежными базами данных и системами цитирования Web of Science и/или Scopus и входящих в перечень изданий, рекомендованных ВАК при Минобрнауки России для опубликования результатов диссертаций.

Все основные результаты, включенные в диссертацию, получены П.А. Колесниченко самостоятельно.

С 2023 года П.А. Колесниченко работает на кафедре радиотехники и электродинамики в должности ассистента, а с июня 2026 года – в должности младшего научного сотрудника, активно участвуя в проведении занятий и научной работе со студентами.

Основные результаты диссертации представляются обоснованными и достоверными. Тема диссертации полностью соответствует специальности 1.3.5. – Физическая электроника. Работа в полной мере удовлетворяет всем 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, а её автор, Колесниченко Павел Андреевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5. – Физическая электроника.

Заведующая кафедрой
радиотехники и электродинамики
ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»,
д.ф.-м.н., профессор

410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83
Тел. 8 (8452) 514688
E-mail: glukhovaoe@info.sgu.ru

