

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по научной работе и цифровому развитию
ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»
доктор физико-математических наук, профессор
Алексей Александрович Короновский



«25» сентября 2026 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Саратовский национальный исследовательский
государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»

по диссертации **Колесниченко Павла Андреевича** «Управление электронным транспортом в квази-2D слоистых ZnO- и CuO-пленках модификацией поверхности» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5. – Физическая электроника, выполненной на кафедре радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского».

Тема диссертационной работы утверждена приказом ректора СГУ от 28.10.2022 г. №154-Д, переутверждена приказом ректора СГУ от 01.09.2026 г. №165-Д.

Соискатель **Колесниченко Павел Андреевич** в 2022 году с отличием окончил ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского» по направлению подготовки 03.04.03 «Радиофизика» с присвоением квалификации «Магистр».

В период подготовки диссертации с 2022 года (приказ о зачислении №346-П от 20.09.2022) по настоящее время является аспирантом ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского» по группе научных специальностей 1.3. Физические науки, специальность 1.3.5. – Физическая электроника.

Справка о сданных кандидатских экзаменах №48-2026 от 14.08.2026 выдана ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского».

Научный руководитель – **Глухова Ольга Евгеньевна**, доктор физико-математических наук, профессор, заведующая кафедрой радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского», утвержденный приказом ректора СГУ от 28.10.2022 г. №154-Д, представила положительный отзыв о диссертации и соискателе.

Научную экспертизу диссертация проходила на расширенном заседании кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского» с приглашением специалистов по профилю диссертации из других структурных подразделений СГУ.

На заседании присутствовали:

1. Аникин Валерий Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
2. Глухова Ольга Евгеньевна, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
3. Москаленко Ольга Игоревна, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики открытых систем института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
4. Давидович Михаил Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
5. Симаков Вячеслав Владимирович, доктор технических наук, доцент, профессор кафедры материаловедения, технологии и управления качеством института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
6. Ушаков Николай Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики твердого тела института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
7. Слепченков Михаил Михайлович, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
8. Шунаев Владислав Викторович, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
9. Колосов Дмитрий Андреевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
10. Барков Павел Валерьевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
11. Черкасова Ольга Алексеевна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
12. Саяпин Кирилл Александрович, кандидат физико-математических наук, старший преподаватель кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
13. Петрунин Александр Алексеевич, старший преподаватель кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
14. Асанов Кирилл Романович, младший научный сотрудник кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;

15. Клычков Никита Александрович, ассистент кафедры материаловедения, технологии и управления качеством института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;

Рецензенты диссертации:

Симаков Вячеслав Владимирович, доктор технических наук, доцент, профессор кафедры материаловедения, технологии и управления качеством института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;

Ушаков Николай Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики твёрдого тела института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;

представили положительные отзывы, в которых указали, что диссертация удовлетворяет 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.

По итогам обсуждения диссертации принято следующее заключение:

Заключение

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

Диссертационная работа Колесниченко П.А. посвящена установлению методами атомистического моделирования физических механизмов изменения электропроводности квази-2D слоистых структур оксидов металлов ZnO с кристаллографическим срезом (11 $\bar{2}$ 0) и CuO с кристаллографическим срезом (111) при модификации их поверхности молекулами газов (спирты и кетоны) в случае ZnO и путем удаления кислорода в поверхностном слое решетки, а также адсорбции атомарного и молекулярного кислорода в случае CuO. Актуальность темы исследования подтверждается высокой востребованностью рассматриваемых оксидных наноматериалов в электронных сенсорах и необходимостью поиска способов управления электропроводными характеристиками этих наноматериалов с целью повышения чувствительности создаваемых на их основе устройств.

Личный вклад соискателя. Все защищаемые положения и основные научные результаты диссертационной работы сформулированы и получены лично соискателем. Соискателем осуществлялось построение атомистических моделей квази-2D слоистых структур ZnO и CuO и выполнена модификация параметризации Слэйтера–Костера в рамках метода SCC DFTB для проведения *in silico* исследований электронных свойств соединений Cu–X (X = Cu, O, S, H). Соискателем проведён весь объём численных экспериментов по расчёту квантового транспорта электронов и выполнена обработка полученных данных. Постановка задач, планирование исследований, обсуждение и интерпретация полученных результатов осуществлялись совместно с научным руководителем.

Достоверность полученных результатов обеспечивается применением широко апробированных при изучении наноструктурированных материалов квантово-механических методов (метод функционала плотности в приближении сильной связи с самосогласованным вычислением заряда SCC-DFTB, метод функционала плотности DFT), использованием в рамках метода SCC-DFTB наборов параметров, эмпирически подобранных и валидированных для исследуемых материалов, количественным совпадением рассчитанных значений ширины запрещённой зоны и электрического сопротивления исходных материалов ZnO и CuO с немодифицированной поверхностью с данными экспериментов, известных из литературы, верификацией разработанной параметризации на 11 суперъячейках различных кристаллических структур. Основные положения работы прошли должную апробацию на профильных конференциях и научных семинарах.

Научная новизна полученных результатов.

1. Построена атомистическая модель квази-2D слоистой пленки материала ZnO с кристаллографическим срезом $(11\bar{2}0)$, при 4 слоях которой воспроизводятся электронно-энергетические характеристики (ширина запрещённой зоны и уровень Ферми) объёмного кристалла ZnO. Полученная модель позволяет устанавливать закономерности изменения электропроводности материала ZnO при модификации поверхности пленки.

2. 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. Установлено, что все исследованные молекулы газов (ацетон, бутанол, циклогексанон, цикlopентанон, этанол, изопропанол, метанол, октанон) являются донорами электронов, передавая парциальный заряд на поверхность n-типа ZnO в диапазоне $0.03\text{--}0.22e$ (e – заряд электрона), что приводит к снижению электрического сопротивления пленки в интервале $\sim 0.4\text{--}29\%$ по сравнению с плёнкой с немодифицированной поверхностью. Наибольшее изменение электропроводности (на $\sim 25\text{--}29\%$) установлено для кетонов и молекулы метанола.

3. Развита физико-математический инструментарий для моделирования протяжённых структур CuO путем создания оригинального модифицированного набора параметров Слэйтера-Костера метода SCC-DFTB для описания взаимодействия атомов меди с атомами кислорода, углерода, водорода. Показано, что использование созданного набора параметров Слэйтера-Костера обеспечивает точность в оценке среднеквадратичного отклонения (RMSD) $0.002\text{--}0.36\text{ \AA}$, что улучшает описание геометрических параметров соединений Cu–O, Cu–Cu, Cu–C, Cu–H в среднем в 4 раза.

4. Раскрыт физический механизм управления электропроводностью квази-2D слоистых пленок CuO с кристаллографическим срезом (111) при модификации поверхностного слоя кислородом. Увеличение проводимости достигается а) удалением решётчатого кислорода из поверхностного слоя (создание кислородных вакансий), а также б) адсорбцией молекулярного кислорода (O_2). В первом случае это физическое явление объясняется

металлизацией поверхности, т.е. увеличением числа атомов меди, для которых характерна высокая электропроводность: атомы меди формируют локальные островки с металлическим характером связи, которые увеличивают плотность состояний вблизи уровня Ферми и, как следствие, интенсивность функции пропускания возрастает, что приводит к уменьшению электрического сопротивления пленок CuO на 4 порядка. Во втором случае происходит трансфер заряда с поверхности плёнки на молекулу кислорода, что приводит к увеличению количества проводящих каналов вблизи уровня Ферми (их больше по сравнению со случаем удаления решетчатого атома кислорода) и, в итоге, сопротивление уменьшается на 8 порядков. При адсорбции атомарного кислорода не происходит заметного трансфера заряда (менее 0.1 заряда электрона по абсолютной величине), электронная плотность адсорбированного кислорода локализована между атомами O и Cu, и не участвует в электропроводности. Выявленные закономерности сохраняются как при концентрации кислорода на поверхности CuO, равной $1,4 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$, так и при $2,8 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-2}$.

Научная и практическая значимость. Разработанная методика построения атомистических моделей квази-2D структур оксидов металлов, воспроизводящих электронные свойства объёмных кристаллов, представляет фундаментальный интерес для решения задач физической электроники по выявлению физических явлений в твердотельных наноструктурах, молекулярных структурах и кластерах и может быть обобщена на другие оксидные полупроводники. 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. Разработанная параметризация Слэйтера–Костера для материала CuO открывает возможность моделирования многоатомных суперъядер оксида меди методом SCC-DFTB, что ранее было невозможно из-за некорректного описания геометрических параметров. Полученные данные об отклике электропроводности CuO (111) на кислородные дефекты важны для оптимизации рабочих характеристик газовых сенсоров на основе оксида меди.

Апробация работы. Результаты работы докладывались и обсуждались на международных и всероссийских научных конференциях: Presenting Academic Achievements to the World (2023), Saratov Fall Meeting (2024, 2025, 2026), V Всероссийская молодёжная конференция «Перспективные материалы и высокоэффективные процессы обработки» (2026). Основные положения диссертации также обсуждались на научных семинарах кафедры радиотехники и электродинамики СГУ имени Н.Г. Чернышевского.

Полнота изложения материалов диссертации в работах.

Результаты диссертации отражены в публикациях автора в полной мере. По теме диссертационной работы опубликовано 4 статьи в научных журналах, рекомендованных ВАК РФ для опубликования основных научных результатов диссертаций на соискание степени кандидата наук:

1. Глухова О.Е., Колесниченко П.А. Управление электронным транспортом в квази-2-слоистых ZnO-наночешуйках с позиции их эффективного применения в твердотельных сенсорах // Журнал технической физики. – 2024. – Т.94. – Вып. 2. – С. 315–321..

Личный вклад автора состоит в проведении расчётов, обработке и анализе данных, написании и редактировании текста.

2. Колесниченко П.А., Глухова О.Е. Развитие подхода к параметризации метода SCC DFTB для переходных металлов на примере оксида меди // Журнал технической физики. – 2025. – Т. 95. – Вып. 5. – С. 1049–1057.

Личный вклад автора состоит в разработке алгоритма, проведении расчётов, обработке и анализе данных, написании и редактировании текста.

3. Глухова О.Е., Колесниченко П.А. Повышение эффективности метода SCC DFTB в описании межатомных взаимодействий и предсказании электронных свойств // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. – 2026. – Т. 26. – Вып. 1. – С. 53–61.

Личный вклад автора состоит в проведении расчётов, обработке данных, интерпретации результатов, написании и редактировании текста.

4. Колесниченко П.А., Глухова О.Е. Развитие Слэйтера–Костера параметризации Cu–X (X = Cu, O, C, H) в рамках метода SCC DFTB для повышения качества *in silico* исследований электронных свойств // Журнал технической физики. – 2026. – Т. 96. – Вып. 5. – С. 1050–1059.

Личный вклад автора состоит в проведении расчётов, обработке и анализе данных, написании и редактировании текста.

Ценность научных работ соискателя учёной степени состоит в развитии физико-математического инструментария для выявления закономерностей квантового транспорта электронов в тонкоплёночных оксидных наноструктурах и в расширении представлений о физических механизмах управления электрической проводимостью квази-2D слоистых структур ZnO- и CuO при модификации их поверхности молекулами газов (кислородсодержащие летучие органические соединения) и кислородом.

Общая оценка диссертации. Диссертационная работа «Управление электронным транспортом в квази-2D слоистых ZnO- и CuO-пленках модификацией поверхности» Колесниченко Павла Андреевича является законченной научно-квалификационной работой, содержащей решение актуальной задачи физической электроники, заключающейся в установлении закономерностей физических явлений транспорта электронов и перераспределения электронной плотности заряда в тонких квази-2D слоистых пленках ZnO и CuO с модифицированной поверхностью с позиции использования таких пленок в устройствах физической электроники, в том числе электронных сенсорах. Диссертация выполнена на высоком уровне с применением современных квантовых методов моделирования наноструктур. Основные положения и результаты диссертации в полной мере опубликованы в научных статьях и представлены на научных конференциях. Тема и содержание диссертации соответствуют специальности 1.3.5. – Физическая электроника, удовлетворяя пунктам 2 и 5 паспорта специальности.

Диссертация «Управление электронным транспортом в квази-2D слоистых ZnO- и CuO-пленках модификацией поверхности» Колесниченко Павла Андреевича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5. – Физическая электроника как удовлетворяющая критериям, установленным пп. 9-11, 13, 14 действующего «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Заключение принято на расширенном заседании кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского». Присутствовало на заседании 12 человек, имеющих право голоса, из них 5 докторов наук и 6 кандидатов наук по профилю диссертации (физико-математические науки). Результаты голосования: «За» - 12 человек, «Против» - нет, «Воздержались» - нет (протокол №2 от 17.09.2026 г.).

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

 24.09.2026

Аникин Валерий Михайлович

