

УТВЕРЖДАЮ:

Проректор по научной работе и цифровому развитию

ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»

Алексей Александрович Короновский

«5» сентября 2022 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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

по диссертации **Баркова Павла Валерьевича** «Закономерности распределения заряда и электронного транспорта в тонких пленках наносетчатого графена, в том числе модифицированного карбоксильными группами» 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 30 декабря 2019 года № 237–Д, переутверждена приказом ректора СГУ от 10 декабря 2021 года №186–Д.

Соискатель **Барков Павел Валерьевич** окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского» в 2019 г. по направлению 03.04.03 «Радиофизика» с присвоением квалификации «Магистр».

Справка о сданных кандидатских экзаменах № 52-2022 выдана 17 августа 2022 года федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского».

В период подготовки диссертации по настоящее время соискатель обучается в аспирантуре ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского» по направлению подготовки 03.06.01 «Физика и астрономия», направленность «Физическая электроника», работает инженером учебной лаборатории электрорадиотехники кафедры радиотехники и электродинамики 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», утверждена приказом ректора СГУ от 30 декабря 2019 года № 237–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, заведующий кафедрой общей, теоретической и компьютерной физики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
2. *Четвериков Александр Петрович*, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры радиофизики и нелинейной динамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
3. *Рыскин Никита Михайлович*, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник СФ ИРЭ РАН, заведующий кафедрой динамических систем на базе СФ ИРЭ РАН института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
4. *Москаленко Ольга Игоревна*, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры физики открытых систем института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
5. *Глухова Ольга Евгеньевна*, доктор физико-математических наук, профессор, заведующая кафедрой радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
6. *Давидович Михаил Владимирович*, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
7. *Тен Галина Николаевна*, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;

8. *Ермолаев Игорь Анатольевич*, доктор физико-математических наук, профессор кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
9. *Нефедов Игорь Сергеевич*, доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник отдела математического моделирования Образовательно-научного института наноструктур и биосистем наноструктур и биосистем ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
10. *Герасименко Александр Юрьевич*, кандидат физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник отдела математического моделирования Образовательно-научного института наноструктур и биосистем наноструктур и биосистем ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
11. *Слепченков Михаил Михайлович*, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
12. *Гребенюк Константин Александрович*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
13. *Шунаев Владислав Викторович*, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»;
14. *Колосов Дмитрий Андреевич*, кандидат физико-математических наук, ассистент кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»

Рецензенты диссертации:

Четвериков Александр Петрович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры радиофизики и нелинейной динамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского» представил положительный отзыв.

Давидович Михаил Владимирович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского» представил положительный отзыв.

Герасименко Александр Юрьевич, кандидат физико-математических наук, доцент, старший научный сотрудник отдела математического моделирования Об-

разовательно-научного института наноструктур и биосистем ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского» представил положительный отзыв.

По итогам обсуждения диссертации принято следующее заключение:

Заключение

по диссертации **Баркова Павла Валерьевича** «Закономерности распределения заряда и электронного транспорта в тонких пленках наносетчатого графена, в том числе модифицированного карбоксильными группами» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5. — «Физическая электроника».

В диссертации Баркова П.В. методами компьютерного моделирования проведено исследование электронных и электропроводных свойств тонких пленок наносетчатого графена (НСГ) в отсутствие модификаций и при модификации поверхности пленок атомами водорода и карбоксильными группами. На основании полученных результатов исследования выявлены способы топологического управления энергетическими параметрами и электропроводностью пленок немодифицированного НСГ и определены конфигурации модифицированного НСГ, оптимальные с позиции их использования в устройствах микро- и наноэлектроники в качестве электропроводящего канала и чувствительного элемента сенсоров.

Научная новизна результатов работы.

1. Выявлены особенности влияния ширины шейки (минимального расстояния между атомами соседних отверстий) на электронные свойства пленки НСГ с круглыми отверстиями диаметром ~ 1.2 нм. Впервые установлено, что размер энергетической щели НСГ может изменяться в пределах 0.01 – 0.37 эВ путем варьирования ширины шейки в диапазоне 0.74 – 5.18 нм.

2. Установлена анизотропия электропроводности тонких пленок НСГ с увеличивающейся шириной шейки в зависимости от выбора направления транспорта электронов (вдоль направления «зигзаг» или вдоль направления «кресло» плоскости графена). Наибольшей удельной электропроводностью обладает НСГ при транспорте электронов вдоль направления «кресло» в случае увеличения ширины шейки вдоль направления «кресло».

3. Получены новые знания о влиянии типа модификации краевых атомов отверстий НСГ атомами водорода на его электронные свойства и анизотропию

электропроводности, а именно, показано, что полное насыщение связей краевых атомов отверстий позволяет «включать» транспорт электронов в одном направлении и полностью «выключать» в противоположном направлении.

4. Разработана оригинальная методика *in silico* модификации краевых атомов отверстия НСГ карбоксильными группами, обеспечивающая удовлетворительное соответствие рассчитанных энергетических (величина энергетической щели, энергия (уровень) Ферми) и электропроводных (электрическое сопротивление) параметров экспериментально устанавливаемым. Методика применима к модификации 2D-наноструктур любым типом функционального элемента. В основе методики – расчёт и анализ распределения избыточной электронной плотности по атомам энергетически стабильного НСГ для выявления атома с наибольшей избыточной плотностью, к которому и присоединяется функциональный элемент.

5. Показано, что посадка молекул аммиака на поверхность пленки НСГ, модифицированной карбоксильными группами, приводит к сдвигу уровня Ферми на 0.1 эВ в направлении от нуля электронвольт, тогда как величина перераспределенного заряда между посаженными молекулами и пленкой пренебрежимо мала, а энергетическая щель остается на уровне ≈ 0.07 эВ, как и у модифицированного НСГ в отсутствие аммиака.

6. Выявлено, что независимо от количества молекул воды при их комбинации с молекулами аммиака уровень Ферми и энергетическая щель пленок НСГ, модифицированного карбоксильными группами, практически не изменяются.

Научно-практическая значимость

Обнаруженная анизотропия электропроводности пленок немодифицированного и модифицированного атомами водорода НСГ представляет фундаментальный интерес с позиции настройки электронных и электропроводных свойств таких пленок путем варьирования их метрических и топологических параметров. С практической точки зрения такие пленки перспективны в качестве материала для устройств с эффектом переключения тока. В свою очередь, пленки НСГ, модифицированного карбоксильными группами, перспективны в качестве чувствительного слоя для мультисенсорных чипов, в том числе в системах электронного носа следующего поколения с пониженным энергопотреблением для контроля состояния окружающей среды.

Результаты диссертационной работы использовались при выполнении государственного задания Минобрнауки FSRR-2020-0004, гранта Российского

научного фонда № 21-19-00226 и гранта Президента РФ для поддержки молодых российских ученых – кандидатов наук (проект № МК-2289.2021.1.2).

Ценность научных работ соискателя определяется тем, что представленные в них результаты расширяют современные представления об особенностях физических явлений транспорта электронов и перераспределения электронной плотности заряда в тонких пленках НСГ с круглыми отверстиями.

Апробация работы. Результаты, представленные в диссертации, докладывались на следующих научных школах, семинарах и конференциях:

- Международная школа для молодых ученых по оптике, лазерной физике и биофотонике «Saratov Fall Meeting» (Саратов, 2019, 2020, 2021 гг.);
- Всероссийская конференция молодых ученых «Нанoeлектроника, нанофотоника и нелинейная физика» (Саратов, 2017, 2019, и 2021 гг.);
- Всероссийская научная молодежная конференция «Актуальные проблемы микро- и наноэлектроники» (Уфа, 2016 и 2018 гг.);
- Всероссийская школа-семинар «Методы компьютерной диагностики в биологии и медицине» (Саратов, 2016 г.)
- XI Научно-практическая конференция «Presenting Academic Achievements to the World» (Саратов, 2020 г.).

Результаты работы также неоднократно обсуждались на научных семинарах кафедры радиотехники и электродинамики и отдела математического моделирования СГУ.

Личный вклад. Все защищаемые положения и результаты сформулированы и получены лично соискателем. Соискателем осуществлялось построение атомистических моделей пленок наносетчатого графена, выполнение численных экспериментов и обработка полученных результатов. Постановка задачи, обсуждение и интерпретация результатов осуществлялись совместно с научным руководителем, а также с соавторами опубликованных работ.

Достоверность полученных результатов обеспечивается применением широко апробированных квантовых методов расчета с набором числовых параметров, эмпирически подобранных для углерод-углеродных и углерод-водородных соединений, использованием специализированных комплексов программ, предназначенных для моделирования наноструктур различной

топологии, в том числе графеновых наноструктур, качественным и количественным совпадением результатов расчета сопротивлений, уровня Ферми и энергетической щели модифицированных карбоксильными группами пленок наносетчатого графена с данными реального эксперимента, проведенного в рамках совместной работы с технологами Физико-технического института имени А.Ф. Иоффе и Саратовского государственного технического университета имени Ю.А. Гагарина, а также широкой апробацией и обсуждением результатов работы на международных и всероссийских конференциях.

Положения, выносимые на защиту:

1. При увеличении ширины шейки (минимального расстояния между атомами соседних отверстий) пленки наносетчатого графена с круглыми отверстиями диаметром ~ 1.2 нм и вдоль направления «зигзаг», и вдоль направления «кресло» листа графена наблюдается анизотропия электропроводности, обусловленная тем, что число проводящих каналов при транспорте электронов вдоль направления «кресло» больше, чем вдоль направления «зигзаг» ввиду неравномерного распределения электронной плотности по атомам графеновой структуры.

2. При последовательном увеличении ширины шейки пленки наносетчатого графена с круглыми отверстиями диаметром ~ 1.2 нм вдоль направления «зигзаг» графенового листа наблюдается скачкообразное изменение удельной электропроводности, полностью повторяющее осциллирующий характер изменения величины энергетической щели пленки. Максимальные значения удельной электропроводности достигаются при шаге изменения ширины шейки, кратном трем. При этом, для одних и тех же значений ширины шейки удельная электропроводность при транспорте электронов вдоль направления «кресло» в несколько раз меньше, чем вдоль направления «зигзаг».

3. Модификация пленок наносетчатого графена с круглыми отверстиями диаметром ~ 1.2 нм атомами водорода, при которой все атомы края отверстия имеют sp^3 -гибридизованные электронные облака, приводит к полному отсутствию проводимости в случае транспорта электронов вдоль направления «зигзаг» листа графена при сохранении проводимости вдоль направления «кресло» за счет перераспределения электронной плотности на краевых атомах отверстия.

4. Посадка молекул аммиака на поверхность пленки наносетчатого графена с круглыми отверстиями диаметром ~ 1.2 нм, модифицированного карбоксильными группами, в присутствии молекул воды на его поверхности вызывает почти двукратное увеличение сопротивления модифицированного наносетчатого графена, обусловленное существенным перераспределением заряда между молекулами воды и поверхностью графена, а также смещением уровня Ферми системы модифицированный графен/вода/аммиак в направлении нуля электронвольт.

Публикации. По теме диссертационной работы опубликовано 12 печатных работ, из них 7 работ в изданиях из перечня ВАК при Минобрнауки России, включая 6 работ в журналах, входящих в международные информационно-аналитические базы данных и системы научного цитирования Web of Science и/или Scopus, 5 – в трудах и сборниках всероссийских и международных конференций.

1. **Barkov P.V.**, Glukhova O.E., Rabchinskii M.K., Sysoev V.V., Brzhezinskaya M., Stolyarova D.Yu., Varezchnikov A.S., Solomatin M.A., Kirilenko D.A., Pavlov S.I., Baidakova M.V., Shnitov V.V., Struchkov N.S., Nefedov D.Yu., Antonenko A.O., Cai P., Liu Z., Brunkov P.N. Guiding Graphene Derivatization for the On-Chip Multisensor Arrays: From the Synthesis to the Theoretical Background // *Advanced Materials Technologies*. – 2022. – Vol. 7. – Iss. 7. – P. 2101250.
2. **Barkov P.V.**, Glukhova O.E. A new method for determining energetically favorable landing sites of carboxyl groups during the functionalization of graphene nanomesh // *Письма о материалах*. – 2021. – Vol. 11. – Iss. 4.–P. 392-396.
3. **Barkov P.V.**, Glukhova O.E. Holey Graphene: Topological Control of Electronic Properties and Electric Conductivity // *Nanomaterials*. – 2021. – Vol. 11. – Iss. 5. – P. 1074.
4. **Barkov P.V.**, Glukhova O.E. Carboxylated Graphene Nanoribbons for Highly-Selective Ammonia Gas Sensors: Ab Initio Study // *Chemosensors*. – 2021. – Vol. 9. – Iss. 4. – P. 84.
5. **Barkov P.V.**, Glukhova O.E., Slepchenkov M.M. The Effect of Hydrogen on the Electrical Properties of the Graphene Nanomeshes // *C-Journal of Carbon Research*. – 2020. – Vol. 6. – Iss. 2. – P. 35.

6. **Barkov P.V.**, Glukhova O.E., Slepchenkov M.M. High-Density Hydrogen Storage in a 2D-Matrix from Graphene Nanoblister: A Prospective Nanomaterial for Environmentally Friendly Technologies // Crystals. – 2018. – Vol. 8. – Iss. 4. – P. 1-8.
7. Глухова О.Е., **Барков П.В.**, Слепченков М.М. Закономерности электропроводности монослойного наносетчатого графена с круглыми отверстиями // Нано- и микросистемная техника. – 2021. – Том 23. – №5. – С. 231-237.
8. Глухова О.Е., **Барков П.В.**, Слепченков М.М. Хранение водорода с высокой плотностью в 2D-матрице из графеновых наноблистеров // Материалы Международного симпозиума и Международной молодежной научной школы Saratov Fall Meeting 2018 «Проблемы оптической физики и биофотоники». – 2018. – С. 49-52.
9. Глухова О.Е., **Барков П.В.**, Слепченков М.М. Влияние топологических особенностей на электронные свойства графеновых наноблистеров // Тезисы докладов V Всероссийской научной молодежной конференции с международным участием «Актуальные проблемы микро- и нанoeлектроники». 2018. – С. 136-137.
10. Глухова О.Е., **Барков П.В.**, Слепченков М.М. Перспективы графеновых наноблистеров в нанoeлектронике // Тезисы докладов XII Всероссийской конференции молодых ученых «Нанoeлектроника, нанofотоника и нелинейная физика». – 2017. – С. 15-16.
11. Глухова О.Е., **Барков П.В.**, Слепченков М.М. Молекулярное моделирование графеновых наноблистеров // Материалы Всероссийской школы-семинара «Методы компьютер-ной диагностики в биологии и медицине –2016». – 2016. – С. 163-165.
12. Глухова О.Е., **Барков П.В.**, Слепченков М.М. Теоретическое прогнозирование энергетической стабильности графеновых наноблистеров // Тезисы докладов IV Всероссийской научной молодежной конференции с международным участием «Актуальные проблемы микро- и нанoeлектроники». – 2016. – С. 75-76.

Общая оценка диссертации. Диссертационная работа «Закономерности распределения заряда и электронного транспорта в тонких пленках наносетчатого графена, в том числе модифицированного карбоксильными группами» является научно-квалификационной работой, содержащей решение актуальной задачи физической электроники, заключающейся в установлении закономерностей физических явлений транспорта электронов и перераспределения плотности электронно-

го заряда в тонких пленках наносетчатого графена с круглыми отверстиями диаметром ~ 1.2 нм, немодифицированных и модифицированных атомами водорода и карбоксильными группами, с позиции использования таких пленок в устройствах микро- и нанoeлектроники, в том числе сенсорах. Диссертация выполнена на высоком уровне с применением современных методов компьютерного моделирования. Основные положения и результаты диссертации в полной мере опубликованы в научных статьях и материалах конференций. Тема и содержание диссертации соответствуют специальности 1.3.5. – «Физическая электроника». 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.

Диссертация «Закономерности распределения заряда и электронного транспорта в тонких пленках наносетчатого графена, в том числе модифицированного карбоксильными группами» Баркова Павла Валерьевича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.5. — «Физическая электроника» как удовлетворяющая критериям, установленным «Положением о присуждении ученых степеней» для кандидатских диссертаций (утверждено Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842).

Заключение принято на расширенном заседании кафедры радиотехники и электродинамики института физики ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского». На заседании присутствовало 14 человек, из них 9 докторов наук и 5 кандидатов наук по профилю диссертации. Результаты голосования: «за» – 14 чел., «против» – нет, воздержались – нет (протокол № 1 от 30 августа 2022 г).

Председательствующий
кандидат физико-математических наук, доцент
доцент кафедры радиотехники и электродинамики
института физики
ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»,



410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83
Тел.: 8(8452)514688
e-mail: slepchenkovm@mail.ru

Слепченков Михаил Михайлович

