

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе и цифровому
развитию

ФГБОУ ВО «Саратовский национальный
исследовательский государственный
университет имени Н.Г. Чернышевского»
доктор физ.-мат. наук, профессор


Алексей Александрович Короновский

« 12 » октября 2022 г.

ОФИЦИАЛЬНЫЙ ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу

Радченко Даниила Павловича

«Новые композиционные материалы на основе пиролизованного
полиакрилонитрила, допированного металлическими наночастицами:
строение и особенности взаимодействия с электромагнитным излучением»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук по специальности 1.3.11. – Физика полупроводников

Актуальность темы диссертации

В настоящее время изучение новых углеродных материалов является перспективным направлением развития науки в области физики твердого тела, нано- и микроэлектроники. Значительное количество исследований посвящено применению таких материалов для экранирования электромагнитного излучения. Ведется поиск композитных материалов, способных эффективно поглощать электромагнитное излучение. Одним из таких материалов является пиролизованный полиакрилонитрил (ППАН), использующийся в виде полимерной углеродной матрицы. Допирование ППАН металлическими наночастицами позволяет создавать металлокомпозитные материалы, кото-

рые могут поглощать электромагнитное излучение в широком диапазоне частот. Актуальной задачей, которая решается в данной работе, является выявление особенностей геометрической и электронно-энергетической структуры металлокомпозита на основе пиролизованного полиакрилонитрила, допированного металлическими частицами и аморфизующими присадками, а также изучение механизмов взаимодействия материала с электромагнитным излучением для установления возможности применения его в качестве нового радиопоглощающего материала.

Структура диссертации и ее основное содержание

Представленная на рассмотрение диссертация изложена на 183 страницах текста, состоит из введения, четырех глав, основных результатов и выводов, списка литературы из 240 наименований, 17 приложений, содержит 21 таблицу и 61 рисунок.

Во введении обоснована актуальность работы, сформулированы цель и задачи исследования, его научная новизна, сформулированы положения, выносимые на защиту, кратко изложено содержание диссертации.

В первой главе представлен обзор публикаций, посвященных исследованию строения, физических характеристик ППАН, а также описанию процесса синтеза металлоуглеродных композитов на его основе. Проанализированы свойства и области применения металлокомпозитов на основе ППАН. Подробно рассмотрены композиты на базе ППАН, включающие в себя сплавы ферромагнитных металлов. Особое внимание уделено композитам с аморфизующими добавками атомов Si, Cr, B. Также рассмотрен вопрос применения новых металлокомпозитов для поглощения излучения в СВЧ диапазоне. Завершается глава выводом о необходимости изучения перспективных металлокомпозитов на базе ППАН, содержащих сплавы металлов, обладающих ферромагнитными свойствами, а также композитов с добавлением атомов меди, оказывающих релаксирующий эффект на решеточные дефекты, и аморфизующих присадок кремния, хрома и бора.

Во второй главе обосновывается целесообразность выбора кластерного подхода для исследования наносистем, содержащих дефекты в виде атомов изучаемых металлов и добавок, для решения исследовательских задач диссертации. Представлены методы теоретического изучения строения и свойств нанокompозитов, использованные при выполнении диссертационной работы. Рассмотрены некоторые особенности полуэмпирических и неэмпирических методов расчета. Особое внимание уделено описанию и обоснованию выбора базисных наборов метода DFT, наиболее предпочтительных при расчетах углеродных наноструктур. Обоснованы упрощения процесса решения уравнений Максвелла для создания модели поглощения электромагнитных волн.

Третья глава содержит результаты исследования влияния парных атомов ферромагнитных металлов, меди и аморфизирующих добавок на электронно-энергетические характеристики металлокомпозитов на основе ППАН.

Четвертая глава посвящена моделированию поглощения электромагнитного излучения в СВЧ и КВЧ диапазонах слоем ППАН, содержащим металлические включения.

Научная новизна диссертационной работы

В диссертационной работе впервые были получены следующие научные результаты:

1. Анализ электронно-энергетической структуры однослойного ППАН с внедренными элементами триады железа Ni-Fe, Ni-Co, Fe-Co или Ni-Fe-Co выявил наличие примесных уровней этих элементов, которые определяют донорные или акцепторные свойства полупроводящего композита.

2. Впервые изучены особенности строения металлокомпозитов на основе слоя ППАН, модифицированного атомами аморфизирующих присадок, а именно систем типа Fe-Ni-M, Ni-Co-M, Fe-Co-M, где M = B, Si, Cr – аморфизирующие присадки, и проанализировано влияние присадок на электронно-энергетическое строение рассмотренных систем.

3. Впервые построены модели и изучены особенности геометрического и электронно-энергетического строения монослоя ППАН с включениями пар атомов Fe-Cu, Ni-Cu, Co-Cu и доказана стабильность конфигурации таких систем.

4. Впервые построены модели взаимодействия слоев нанокomпозитов на основе ППАН, содержащих металлические частицы, имеющих различные значения толщины и электропроводности, с электромагнитным излучением в СВЧ и КВЧ диапазонах от 1 ГГц до 50 ГГц. Также определена зависимость проницаемости ППАН электромагнитной волной от варьируемых параметров.

Практическая значимость диссертационной работы

Результаты диссертационной работы могут быть использованы для объяснения экспериментально полученных характеристик и свойств металлокомпозитов на основе пиролизованного полиакрилонитрила, допированного элементами триады железа и аморфизующими атомами, и для определения направлений новых исследований ППАН. Также результаты диссертационной работы могут быть применены при создании новых устройств и изделий микро- и нанoeлектроники. Построенная модель и изученный механизм взаимодействия электромагнитного излучения с металлокомпозитом будут полезны при разработке новых радиопоглощающих покрытий для применения в радиотехнике, в системах радиоэлектронной и информационной безопасности.

Достоверность полученных результатов

Достоверность полученных в диссертационной работе результатов и сделанных выводов соответствует достоверности кластерной модели и всемирно известного метода теории функционала плотности (DFT), корректным применением программного пакета COMSOL MultiPhysics и соответствием полученных теоретических результатов экспериментальным результатам и характеристиками ППАН.

Оформление диссертации, публикации и апробация

Диссертация написана логично, структура и содержание соответствуют целям и задачам исследования. Результаты диссертационной работы обсуждены на конференциях всероссийского и международного уровней и достаточно полно опубликованы в 11 печатных работах, из них 1 статья в журнале, рекомендованном ВАК и 3 статьи в изданиях, включенных в международные базы цитирования Web of Science и SCOPUS. Автореферат диссертации и публикации правильно и полно отражают содержание работы.

Замечания по диссертационной работе:

1. В работе недостаточно внимания уделяется физическому обоснованию способов создания радиопоглощающих материалов на основе ПЛАН с магнитомягкими металлическими включениями, что не вполне очевидно.
2. Большинство полученных в работе результатов носят теоретический характер и слабо подтверждены практическими экспериментами. Это не позволяет оценить адекватность и точность разрабатываемых моделей.
3. При описании результатов квантовохимических расчетов не приводятся данные о погрешностях применяемых методов и способах их оценивания.
4. В работе не приводится обоснование выбора вида и размера молекулярного кластера ПЛАН, используемого в работе, не рассмотрены возможность применения циклических условий, позволяющих моделировать протяженные системы, к которым относится объект диссертационного исследования.

Сделанные замечания, однако, не снижают положительной оценки диссертации как научно-квалификационной работы, так как не затрагивают ее основные положения и выводы.

Общая оценка диссертационной работы

Диссертационная работа Радченко Д.П. является завершенной научно-

квалифицированной работой, в которой на основании выполненных автором исследований и их интерпретации получены новые результаты, совокупность которых можно квалифицировать как решение задачи, имеющей значение для физики полупроводников. Работа выполнена на высоком научном уровне. Поставленные в работе цель и задачи полностью достигнуты, а основные результаты отражены в выводах. Выводы и результаты обоснованы и достоверны.

Содержание диссертационной работы соответствует паспорту специальности 1.3.11. – Физика полупроводников. Автореферат соответствует требованиям, предусмотренным п. 25 «Положения о присуждении ученых степеней», его содержание достаточно полно отражает содержание диссертации, полученные результаты и выводы.

Диссертация и автореферат оформлены в соответствии с предъявляемыми требованиями, язык и стиль изложения соответствуют литературным нормам.

В целом, по актуальности и уровню решения поставленных задач, объему выполненных исследований, научной новизне, достоверности, практической значимости полученных результатов и выводов диссертационная работа Радченко Д.П. «Новые композиционные материалы на основе пиролизованного полиакрилонитрила, допированного металлическими наночастицами: строение и особенности взаимодействия с электромагнитным излучением» соответствует критериям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, установленным «Положением о порядке присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском технологическом университете "МИСиС"», а ее автор – Радченко Даниил Павлович - заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.11. – физика полупроводников.

Диссертация была заслушана и обсуждалась на расширенном научном семинаре Научно-технологического центра "Микро- и наноэлектроника" в ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского» 12 октября 2022 г. (протокол

№2). На заседании присутствовало 8 человек. Результаты голосования по проекту отзыва: «за» - 8, «против» - 0, «воздержалось» - 0.

Руководитель НТЦ "Микро- и нанoeлектроника"
доктор физико-математических наук,
старший научный сотрудник

Сергей Германович Сучков

Подпись Сучкова С.Г. заверяю

Ученый секретарь СГУ, к.х.н.

И.В.Федусенко

