

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ КОМИССИИ

по защите диссертации Радченко Даниила Павловича

на тему **«Новые композиционные материалы на основе пиролизованного полиакрилонитрила, допированного металлическими наночастицами: строение и особенности взаимодействия с электромагнитным излучением»**, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.11 – «Физика полупроводников», состоявшейся в НИТУ «МИСиС» 23.11.2022 г.

Диссертация принята к защите Диссертационным советом НИТУ «МИСиС» 19.09.2022 г., протокол № 4.

Диссертация выполнена на кафедре судебной экспертизы и физического материаловедения Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Волгоградский государственный университет» (ФГАОУ ВО ВолГУ), Министерство образования и науки Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор, Почетный работник высшего образования РФ Запороцкова Ирина Владимировна, директор института приоритетных технологий ФГАОУ ВО ВолГУ.

Экспертная комиссия утверждена Диссертационным советом НИТУ «МИСиС» (протокол № 4 от 19.09.2022 г.) в составе:

1. Ховайло Владимир Васильевич – доцент, доктор физико-математических наук, профессор кафедры функциональных наносистем и высокотемпературных материалов НИТУ «МИСиС» – председатель комиссии;
2. Панина Лариса Владимировна – доктор физико-математических наук, профессор кафедры технологии материалов электроники НИТУ «МИСиС»;
3. Костишин Владимир Григорьевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой технологии материалов электроники НИТУ «МИСиС»;
4. Козлов Владимир Валентинович – доктор технических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории «Химия полисопряженных систем» института нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук (ИНХС РАН);
5. Дьячков Павел Николаевич – доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории квантовой химии Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН.

В качестве ведущей организации утвержден Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского (ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»).

Экспертная комиссия отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

1. Доказано, что внедрение атомов кобальта, железа, никеля в различных сочетаниях в монослой ППАН приводит к изменению ширины запрещенной щели

полученной системы и, соответственно, к изменению основных характеристик ППАН, влияющих на способность поглощения электромагнитного излучения металлокомпозитом.

2. Установлено, что добавление атомов кремния, бора и хрома, взятых в различных сочетаниях, к монослою ППАН приводит к появлению связей между этими атомами и базовой матрицей нанокомпозита и появлению дополнительных уровней, соответствующих атомам Si, B и Cr, что влияет на электронно-энергетическое строение системы.

3. Доказано, что парные сочетания элементов триады железа и атома меди (Fe-Cu, Ni-Cu, Co-Cu), внедренные в монослой пиролизованного полиакрилонитрила, не влияют на стабильность полученной композитной системы, но приводят к изменению ширины запрещенной щели системы по сравнению с чистым монослоем ППАН.

4. Теоретически установлено, что эффективность поглощения электромагнитного излучения в СВЧ диапазоне металлокомпозитом на основе ППАН зависит от концентрации металлов в нем, а также от толщины слоя материала и его электропроводности.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- доказана возможность управления шириной запрещенной щели ППАН путем внедрения атомов кобальта, железа, никеля в различных сочетаниях в монослой ППАН, что приведет к изменению основных характеристик ППАН, влияющих на способность поглощения электромагнитного излучения металлокомпозитом;
- определена электронно-энергетическая структура однослойного ППАН с внедренными элементами триады железа Ni-Fe, Ni-Co, Fe-Co или Ni-Fe-Co и выявлено наличие примесных уровней этих элементов, отвечающих за донорные или акцепторные свойства полупроводящего композита;
- показано, что проницаемость металлокомпозита на основе ППАН при его взаимодействии с электромагнитным излучением в СВЧ диапазоне на частотах 1–3 ГГц и 3–50 ГГц зависит от толщины и электропроводности полимера, содержащего металлические частицы.

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

- продемонстрирована возможность изменения проводящих характеристик ППАН путем внедрения атомов элементов триады железа, взятых в различных сочетаниях, что повлияет на поглощающие способности металлокомпозита;
- созданы модели металлокомпозитов на основе слоя ППАН, модифицированного системами атомов типа Fe-Ni-M, Ni-Co-M, Fe-Co-M, где M = B, Si, Cr, и проанализировано влияние присадок на электронно-энергетическое строение рассмотренных систем;
- установлен факт зависимости эффективности поглощения электромагнитного излучения в СВЧ диапазоне металлокомпозитом на основе ППАН от концентрации металлов в нем, от толщины слоя материала и его электропроводности, что

позволяет предсказать возможность применения таких систем в качестве новых радиопоглощающих материалов.

Достоверность научных результатов подтверждается использованием современных и апробированных методов компьютерного моделирования, выбором адекватных моделей и соблюдением пределов применимости используемых подходов и приближений, согласием выводов исследования с основными физическими закономерностями, совпадением ряда полученных расчетных результатов с экспериментальными результатами, в том числе, ранее опубликованными в отечественной и зарубежной печати, публикациями в рецензируемых журналах.

Личный вклад соискателя состоит в том, что результаты, составившие основу диссертации, получены лично автором. Автор лично занимался обработкой результатов моделирования и теоретических расчетов. Основные положения работы обсуждались и опубликованы в соавторстве с научным руководителем профессором, доктором физико-математических наук Запороцковой И.В.

Основные положения диссертации опубликованы в 11 печатных работах, из них 1 статья в журнале, рекомендованном высшей аттестационной комиссией (ВАК) Российской Федерации, 3 статьи, включенные в международные базы цитирования Web of Science и SCOPUS, 7 работ, опубликованных в материалах научных конференций (5 из которых – международные).

Пункт 2.6 Положения присуждения ученой степени кандидата наук, ученой степени доктора наук НИТУ «МИСиС» соискателем ученой степени не нарушен.

Диссертация Радченко Д.П. соответствует критериям п. 2 Положения о порядке присуждения ученых степеней в НИТУ «МИСиС», так как в ней на основании выполненных автором теоретических исследований с использованием современных расчетных методов и моделей, установлены особенности электронно-энергетической структуры металлокомпозита на основе пиролизованного полиакрилонитрила, допированного металлическими частицами и аморфизующими присадками, изучены механизмы взаимодействия материала с электромагнитным излучением, что позволило установить возможности применения его в приборах нано- и микроэлектроники и в качестве нового радиопоглощающего материала. Результаты, полученные в данной работе, имеют большое научное значение и перспективны при решении практических задач.

Экспертная комиссия приняла решение о возможности присуждения Радченко Даниилу Павловичу ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.11 – «Физика полупроводников».

При проведении тайного голосования экспертная комиссия в количестве 5 человек, участвовавших в заседании, из 5 человек, входящих в состав комиссии, проголосовала: за 5, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель Экспертной комиссии



В.В. Ховайло

23.11.2022 г.