

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ЭКСПЕРТНОЙ КОМИССИИ

по защите диссертации Борознина Сергея Владимировича
на тему **«Углеродные наноструктуры с примесными атомами бора: исследования строения и свойств»**, представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.11 – «Физика полупроводников», состоявшейся в НИТУ «МИСИС» 21.06.2023 г.

Диссертация принята к защите Диссертационным советом НИТУ «МИСИС» 20.03.2023 г., протокол № 9.

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

Научный консультант – 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 № 9 от 20.03.2023 г.) в составе:

1. Ховайло Владимир Васильевич – 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, заведующий кафедрой технологии материалов электроники НИТУ «МИСИС»;
4. Дьячков Павел Николаевич – доктор химических наук, главный научный сотрудник лаборатории квантовой химии Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН;
5. Ткачев Алексей Григорьевич – доктор технических наук, заведующий кафедрой «Техника и технологии производства нанопродуктов» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тамбовский государственный технический университет»;
6. Шевяков Василий Иванович – доктор технических наук, профессор кафедры интегральной электроники и микросистем Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники»;
7. Форш Павел Анатольевич – доктор физико-математических наук; профессор кафедры общей физики и молекулярной электроники физического факультета федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова» (на момент подачи согласия члена экспертной комиссии - доцент).

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. Построены модели и выполнены теоретические исследования в рамках теории функционала плотности углеродных нанотрубок с равномерным распределением примесных атомов бора, взятым в различных концентрациях (15%, 25%, 50%), и впервые теоретически подтверждена обратная зависимость ширины запрещенной щели от степени легирования, которая наблюдалась на экспериментальных данных по проводимости боросодержащих нанотрубок, что доказывает корректность построенных моделей, обосновывает и объясняет результаты эксперимента.
2. Проведено исследование особенностей взаимодействий углеродных нанотрубок, содержащих 15% примесных атомов бора, с атомами водорода, кислорода, хлора и фтора, что позволило выявить увеличение числа адсорбционных центров на поверхности нанотрубок с ростом концентрации примесных атомов бора.
3. Установлена зависимость между концентрацией примесных атомов бора в углеродных нанотрубках и высотой потенциального барьера, возникающего при интеркалировании наноструктур атомами водорода, кислорода, хлора и фтора, а именно, выявлено, что с увеличением примесных атомов бора происходит уменьшение высоты потенциального барьера.
4. Проведен модельный эксперимент процесса взаимодействия атомов металлов лития, калия и натрия с углеродными нанотрубками, содержащими различные концентрации примесных атомов бора (15%, 25%, 50%), установивший, что увеличение количества атомов примеси приводит к увеличению количества адсорбционных центров на поверхности нанотрубки, а при внутреннем заполнении нанотрубки высота потенциального барьера на пути внедряющегося атома металла уменьшается при увеличении концентрации атомов бора.
5. На основании построенных моделей теоретически подтверждена прямая зависимость ширины запрещенной зоны ΔE_g графена от концентрации примесных атомов бора в нем (с увеличением количества бора происходит увеличение величины ΔE_g), что согласуется с экспериментальными данными, указывающих на полупроводниковый характер бороуглеродных нанослоев. Учитывая известную связь ширины запрещенной зоны и показателя преломления среды, можно предположить применение графена, модифицированного атомами бора, в качестве двумерных фотонных кристаллов для использования в устройствах задержки и управления полем излучения.
6. Изучен механизм и доказана возможность использования графеновых нанослоев, содержащих примесные атомы бора, в качестве материалов, обладающих структурной периодичностью расположения атомов в них, с активационной проводимостью. Обнаружено, что с увеличением количества

примесных атомов В происходит снижение энергии активации процесса перемещения вакансии по поверхности графена, модифицированного атомами бора.

7. Построены модели краевого и поверхностного модифицирования углеродных нанотрубок с содержанием примесных атомов бора 15% и проведена систематизация зависимости данного процесса от количества примесных атомов бора. Установлено, что при проведении легирования атомарным бором повышается энергия взаимодействия модифицированных нанотрубок с атомами металлов, что подтверждает вероятность более эффективного их использования в качестве активного материала сенсорных нанодатчиков.
8. Впервые проведена систематизация электронных и физико-химических свойств углеродных нанотрубок и графена, содержащих примесные атомы бора, позволяющая оптимизировать функциональные свойства данных объектов для практических применений.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- исследованы особенности электронно-энергетического строения углеродных нанотрубок с различным содержанием примесных атомов бора от 15 до 50% для установления зависимости их проводящих характеристик и структурных особенностей от концентрации атомов примеси;
- изучены особенности образования вакансионного дефекта на поверхности боросодержащих нанотрубок и определено влияние на формирование дефекта взаимной ориентации атомов бора и углерода на поверхности нанотрубки;
- исследованы механизмы внутреннего заполнения водородом и кислородом боросодержащих нанотрубок для определения влияния концентрации примесных атомов бора на процесс интеркалирования;
- исследован механизм образования дефекта в углеродных нанослоях графена, содержащих примесные атомы бора, и сделан вывод об их влиянии на процесс образования вакансий и проводимость в нанослое

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

- продемонстрирована зависимость эффективности заполнения полости углеродных нанотрубок атомами металлов от концентрации замещающих атомов бора, что позволит совершенствовать технологию создания так называемых нанопроводов на их основе;
- созданы модели сенсорных зондов на основе гранично- и поверхностно-модифицированных боросодержащих нанотрубок, в перспективе используемых в качестве острия кантиливера атомно-силового микроскопа, чувствительного к присутствию сверхмалых количеств веществ вплоть до единичных атомов;
- изучено влияние концентрации примесных атомов бора на формирование сверхрешетки атомов металла над поверхностью бороуглеродных нанотрубок и предсказана возможность управления этим процессом для создания композитных наноструктур с заданными проводящими характеристиками;

- Доказано, что добавление примесных атомов бора в углеродные нанотрубки позволяет улучшить их химическую активность в отношении газов (угарного, фтора и хлора), а изменение при этом ширины запрещенной зоны является индикатором, лежащим в основе функционирования сенсорных или фильтрующих полупроводниковых наноэлектронных датчиков;
- продемонстрировано, что зависимость ширины запрещенной зоны и показателя преломления в графеновых нанослоях, содержащих примесные атомы бора, от его концентрации позволяет использовать их в качестве материала для создания двумерных фотонных кристаллов;
- установлены основные закономерности влияния замещающих примесных атомов бора на основные свойства модифицированных углеродных нанотрубок и нанослоев для управления проводящими и сорбционными свойствами одно- и двумерных углеродных наносистем.

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 консультантом профессором, доктором физико-математических наук Запороцковой И.В.

Основные положения диссертации опубликованы в 100 научных работах, среди них 52 статьи, входящие в международные реферативные базы данных и системы цитирования из Перечня ВАК РФ, из которых 41 в международных базах данных Scopus/Web of Science, 12 статей в рецензируемых научных изданиях, 21 тезис докладов на конференциях, 2 монографии, 2 базы данных, 2 учебных пособия, 4 учебно-методических рекомендации.

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

Диссертация Борознина С.В. соответствует критериям п. 2 Положения о порядке присуждения ученых степеней в НИТУ «МИСИС», так как проведенные исследования можно классифицировать как значительное научное достижение в области физики полупроводников, развивающее научное направление по созданию новых устройств наноэлектроники и полупроводниковой техники путем создания модифицированных примесными атомами одномерных и двумерных наноструктур. Результаты, полученные в данной работе, имеют большое научное значение и перспективны при решении практических задач.

Экспертная комиссия приняла решение о возможности присуждения Борознину Сергею Владимировичу ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.11 – «Физика полупроводников».

При проведении тайного голосования экспертная комиссия в количестве **6** человек, участвовавших в заседании, из **7** человек, входящих в состав комиссии, проголосовала: за **6**, против **0**, недействительных бюллетеней **0**.

Председатель Экспертной комиссии



В.В. Ховайло

21.06.2023 г.