

УТВЕРЖДАЮ

Директор Федерального исследовательского  
центра химической физики им. Н.Н. Семёнова  
Российской академии наук  
(ФИЦ ХФ РАН)  
д.х.н., проф. В.А. Надточенко

«05»июля 2022 г.

ВЫПИСКА  
ИЗ ПРОТОКОЛА № 6

расширенного заседания семинара лаборатории функциональных нанокompозитов  
Федерального государственного бюджетного учреждения науки  
Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова  
Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)  
от 06 июня 2022 г.

**Председатель:** заведующий лабораторией функциональных нанокompозитов ФИЦ ХФ  
РАН, д.ф.-м.н., проф. Трахтенберг Л.И.

**Секретарь:** старший научный сотрудник лаборатории функциональных нанокompозитов  
ФИЦ ХФ РАН, к.ф.-м.н. Иким М.И.

**Присутствовали:** д.ф.-м.н., проф. Трахтенберг Л.И., д.ф.-м.н. Уманский С.Я.,  
д.х.н. Синёв М.Ю., д.ф.-м.н. Голубков М.Г., д.ф.-м.н. Гришин М.В.,  
д.ф.-м.н. Шушин А.И., д.ф.-м.н. Аветисов В.А., д.ф.-м.н. Власов П.А.,  
к.ф.-м.н. Посвянский В.С., к.ф.-м.н. Беляев А.А., к.ф.-м.н. Иким М.И.,  
к.ф.-м.н. Боднева В.Л.

**Повестка дня:** обсуждение диссертационной работы Курмангалеева Кайрата  
Сансыбаевича на тему: «Моделирование электронной структуры и сенсорных свойств  
наноструктурированных смешанных оксидов», представленной на соискание ученой  
степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 — химическая  
физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

**Слушали:** доклад младшего научного сотрудника лаборатории функциональных  
нанокompозитов ФИЦ ХФ РАН Курмангалеева Кайрата Сансыбаевича на тему:  
«Моделирование электронной структуры и сенсорных свойств наноструктурированных  
смешанных оксидов».

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки  
Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова  
Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)

Диссертация «Моделирование электронной структуры и сенсорных свойств наноструктурированных смешанных оксидов» выполнена в лаборатории функциональных нанокompозитов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН). В период подготовки диссертации соискатель Курмангалеев Кайрат Сансыбаевич работал в должности инженера-исследователя и младшего научного сотрудника лаборатории функциональных нанокompозитов ФИЦ ХФ РАН.

В 2017 году Курмангалеев К.С. окончил магистратуру Оренбургского государственного университета (ОГУ) по направлению подготовки 03.04.02 «Физика». В 2018 году принят на должность младшего научного сотрудника в лабораторию окисления углеводов Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН). В 2019 году был переведен на должность младшего научного сотрудника в лабораторию функциональных нанокompозитов ФИЦ ХФ РАН, где продолжает свою научную деятельность до настоящего момента.

**Научный руководитель:** Трахтенберг Леонид Израйлевич, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории функциональных нанокompозитов Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН).

После доклада состоялось обсуждение работы. Вопросы задавали и участвовали в обсуждении работы:

д.ф.-м.н. Уманский С.Я.

д.х.н. Синёв М.Ю.

д.ф.-м.н. Гришин М.В.

д.ф.-м.н. Шушин А.И.

д.ф.-м.н. Аветисов В.А.

По докладу были заданы следующие вопросы:

1. д.ф.-м.н. Шушин А.И.: Какого рода у вас наночастицы: кристаллическая или аморфная у них структура?

2. д.ф.-м.н. Шушин А.И.: Почему сенсорный эффект может быть рассчитан как отношение концентраций приповерхностной плотности электронов при наличии и отсутствии водорода в системе? Как вы при этом учитываете переходы электронов между контактами наночастиц?

3. д.х.н. Синёв М.Ю.: Каково в вашей модели расстояние между адсорбционными центрами?

4. д.ф.-м.н. Гришин М.В.: Почему выбиралась именно поверхность  $\text{In}_2\text{O}_3(011)$  для моделирования СТМ-изображения?

5. д.ф.-м.н. Уманский С.Я.: Какова по вашим расчётам величина электрического поля внутри наночастицы в результате адсорбции кислорода на её поверхность?

6. д.х.н. Синёв М.Ю.: В записанных вами реакция не учтён адсорбат в виде  $\text{O}_2^-$ . С чем связано такое допущение?

7. д.ф.-м.н. Аветисов В.А.: Сколько составляет характерное время захвата электрона адсорбированным атомом кислорода. И для чего вам эта модель нужна?

Докладчик подробно ответил на все поставленные вопросы.

По итогам обсуждения рассмотренной диссертации принято следующее заключение:

**Личное участие соискателя.** Результаты, представленные в диссертации, получены при непосредственном участии автора включая выбор задачи исследования, построение модели, обработку результатов экспериментов.

**Степень достоверности полученных результатов** полученных в работе результатов обеспечивается использованием апробированных экспериментальных методов. В экспериментах одновременно использовались методы, основанные на различных физических принципах. Результаты экспериментов и теоретических расчётов находятся в соответствии с данными полученными ранее другими авторами.

#### **Научная новизна.**

1. Найдено распределение электронной плотности в полупроводниковых наночастицах с большой концентрацией электронов проводимости (на примере оксида индия). Учтено влияние температуры, давления кислорода и анализируемого газа на распределение электронов по радиусу наночастицы. При этом количество отрицательно заряженных атомов кислорода на поверхности наночастицы определяется из решения кинетических уравнений.

2. В рамках теории функционала плотности получены параметры адсорбции молекулярного кислорода на одну из наиболее устойчивых поверхностей оксида индия

(011): теплота адсорбции, энергия активации адсорбции и частоты валентных колебаний атомов в адсорбированной молекуле кислорода.

3. На основе экспериментальных данных по кинетике изменения сопротивления наноструктурированной плёнки  $\text{In}_2\text{O}_3$  проведены оценки константы скорости захвата электрона проводимости из полупроводниковой наночастицы адсорбированным атомом кислорода и константы скорости реакции молекулы водорода с анионом кислорода на поверхности наночастиц.

4. Получено распределение электронной плотности в двухкомпонентных полупроводниковых системах при различных температурах и радиусах наночастиц с учетом физико-химических процессов на поверхности наночастиц.

5. Найдена температурная зависимость сенсорного эффекта в одно- и двухкомпонентных наноразмерных системах. Получено согласие теории с экспериментальными данными на примере чувствительности к водороду систем  $\text{In}_2\text{O}_3$  и  $\text{CeO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$ .

**Теоретическая и практическая значимость работы.** Разработанные в работе методы определения зависимости электронной плотности от радиуса наночастиц в одно- и двухкомпонентных системах востребованы в различных областях знаний. Наряду с рассматриваемой в диссертации сенсорной характеристикой таких систем, полученная информация необходима также при изучении фотоэлектрических, магнитных, диэлектрических, каталитических и других свойств нанокompозитов. Кроме того, построенная модель наносистем и сенсорного эффекта с учетом рассчитанных квантово-химическими методами параметров адсорбции молекулярного кислорода и найденных экспериментально констант скорости имеет заметное практическое значение, т.к. позволит подбирать рабочую температуру, оптимальные соотношения концентраций и размеры нанокompонентов для эффективной работы сенсоров.

**Ценность научных работ** соискателя подтверждена в ходе их представления и обсуждения на Всероссийских и Международных конференциях: VIII Всероссийская научная молодёжная школа-конференция «Химия, физика, биология: пути интеграции» (г. Москва, Россия 2019), Международный молодёжный научный форум «Ломоносов-2021» (г. Москва, Россия 2021), 64-я Всероссийская научная конференция МФТИ (г. Москва, Россия 2021), XXIII Всероссийский симпозиум «Современная химическая физика» (г. Туапсе, Россия 2021).

По материалам диссертации опубликовано 6 работ в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК. Материалы диссертации полностью изложены в опубликованных работах.

Диссертация соответствует требованиям пункта 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года и «Изменений, которые вносятся в Положение о присуждении ученых степеней», утвержденных постановлением Правительства Российской Федерации № 335 от 21 апреля 2016 года. Она является научно-квалификационной работой, в которой развиты методы определения зависимости электронной плотности от радиуса наночастиц в одно- и двухкомпонентных системах, имеющие значение для исследования фотоэлектрических, магнитных, диэлектрических, каталитических и других свойств функциональных нанокompозитов.

Диссертация Курмангалеева Кайрата Сансыбаевича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 — химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Заключение принято на заседании расширенного семинара лаборатории функциональных нанокompозитов ФИЦ ХФ РАН. Присутствовало на заседании 12 чел. Результаты голосования:

«за» — 12

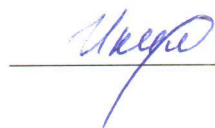
«против» — нет

«воздержались» — нет

Председатель семинара  
г.н.с. лаборатории функциональных нанокompозитов  
ФИЦ ХФ РАН  
д.ф.-м.н., проф.

 Л.И. Трахтенберг

Секретарь  
с.н.с. лаборатории функциональных нанокompозитов  
ФИЦ ХФ РАН  
к.ф.-м.н.

 М.И. Иким

06 июня 2022 года