

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор Федерального государственного
бюджетного учреждения науки Института
биохимической физики им. Н.М. Эмануэля
Российской академии наук (ИБХФ РАН)

д.х.н., профессор

И. Н. Курочкин

2025 г.



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук.

Диссертация «Моделирование структуры и электронных свойств новых муаровых и квазикристаллических алмазов» выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Института биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук (ИБХФ РАН).

В период подготовки диссертации Демин Виктор Александрович обучался в аспирантуре ИБХФ РАН и работал в должности научного сотрудника. Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2025 г.

В 2011 г. Демин Виктор Александрович окончил Сибирский Федеральный университет по специальности физика конденсированного состояния вещества

Научный руководитель диссертации - доктор физико-математических наук, профессор, Чернозатонский Леонид Александрович работает главным научным сотрудником в ИБХФ РАН в лаборатории акустической микроскопии отдела новых методов биохимической физики.

По итогам рассмотрения диссертации Демина Виктора Александровича на тему «Моделирование структуры и электронных свойств новых муаровых и квазикристаллических алмазов» принято следующее:

Актуальность исследования

Тема исследования представляет интерес для современной физики и химии твердого тела в области изучения свойств наноструктур. Диссертация В. А. Демина посвящена вопросу исследования атомной структуры и предсказанию электронных свойств новых наноструктур на основе бислойного и малослойного графена, а также бислоя графен/нитрид бора с помощью метода теории функционала электронной плотности. Алмазы и алмазоподобные материалы уже синтезируются в различных лабораториях мира, поэтому предсказание зависимости свойств от различных модификаций их структуры является крайне важной задачей, как в теоретической, так и в экспериментальной физике. Данные, полученные в диссертационной работе, дают возможность сделать ряд важных заключений о физических свойствах рассмотренных наноструктур. Поэтому актуальность работы Демина В. А. не вызывает сомнений.

Целью работы является систематическое исследование структуры, стабильности и электронных свойств новых sp^3 -гибридизованных углеродных двумерных наноструктур -

диамановых пленок на основе свернутого бислойного и малослойного графена, а также бислоя графен/нитрид бора в зависимости от угла поворота слоев и типа адатомов квантово-химическими методами.

Научная новизна

В диссертационной работе впервые были получены следующие результаты:

Приведенные результаты получены впервые:

- Построены модели диаманов на основе муаровых биграфенов с углами свертки $\theta=21.8^\circ$, 27.8° и 29.4° .
- Фторированные муаровые диаманы имеют наибольшую запрещенную зону, которая достигает 4.5 эВ для структуры на основе биграфена с $\theta=27.8^\circ$.
- Показана стабильность гидрированных, фторированных и Янус структур на основе расчетов энергий образования и спектров фононных колебаний.
- Показано, что хлорирование не позволяет получить полностью sp^3 гибридную структуру муарового диамана.
- Построены модели диаманов на основе гидрированного малослойного графена со специфическими упаковками слоев $0\theta\theta$ и $0\theta\theta\theta$, где $\theta=27.8^\circ$. Предложен метод их формирования.
- Рассмотрен случай алмазоподобного кристалла на основе графита со специфической упаковкой слоев $0\theta\theta\theta$, где $\theta=27.8^\circ$.
- Построена модель и мозаика квазикристалла диамана. Показано, что квазикристалл имеет симметрию 6 порядка, а его мозаика состоит из шести элементов.
- Оценка запрещенной зоны, проведенная на основе расчетов кластеров и аппроксиманта, показала, что гидрированный и фторированный квазикристаллы имеют запрещенную зону 3.5 и 4.0 эВ, соответственно.
- Исследована возможность использования бислоя графен/нитрид бора в качестве основы для диаманоподобной структуры. Моделирование проводилось на примере гидрированных и фторированных бислоев с учетом несоразмерности решеток графена и нитрида бора. Показана высокая стабильность фторированных структур и наличие запрещенной зоны до 3.1 эВ.

Результаты диссертационной работы Демина В.А. базируются на оригинальных идеях, важны для нанoeлектроники и могут быть использованы в Московском физико-техническом институте (государственном университете), ФГБНУ Технологическом институте сверхтвердых и новых углеродных материалов, ФГБУН Институте спектроскопии РАН, Национальном исследовательском технологическом институте «МИСиС» и других научных институтах и центрах при интерпретации экспериментов по изучению низкоразмерных алмазоподобных наноструктур.

Публикации

По материалам диссертации опубликовано 16 печатных работ: 5 статей в научных журналах, рекомендованных ВАК России и 11 тезисов докладов, представленных на международных и всероссийских научных конференциях.

Статьи

1. Chernozatonskii L. A., Demin V. A., Kvashnin D. G., Ultrawide-bandgap Moiré diamanes based on bigraphenes with the twist angles $\Theta \sim 30^\circ$ // Appl. Phys. Lett. 2020. Vol. 117, №253104.
2. Chernozatonskii L. A., Demin V. A., Kvashnin D. G., Fully Hydrogenated and Fluorinated Bigraphenes–Diamanes: Theoretical and Experimental Studies // C. 2021. Vol. 7, №17.
3. Chernozatonskii L. A., Demin V. A., Kvashnin A. G., Kvashnin D. G., Diamane quasicrystals // Appl. Surf. Sc. 2022. Vol. 572, №151362.

4. Чернозатонский Л.А., Демин В.А., Алмазо-подобные пленки из нескольких свернутых графенов // Письма в ЖЭТФ. 2022. Т. 115, №3. С. 184-189.
5. Demin V. A., Chernozatonskii L. A., Diamane-like Films Based on Twisted G/BN Bilayers: DFT Modelling of Atomic Structures and Electronic Properties // Nanomaterials. 2023. Vol. 13, №841.

Тезисы

1. Ab-initio investigation of Raman and IR spectra of Moiré diamanes / V.A. Demin, K.P. Katin, M.M. Maslov, L.A. Chernozatonskii // CMD2020GEFES, Мадрид, Испания, 31 августа-4 сентября 2020.
2. Ab-initio исследование диаманов, основой которых является муаровый бислойный графен / В. А. Демин, Л. А. Чернозатонский // XX ежегодная молодежная конференция с международным участием ИБХФ РАН-вузы и IV симпозиум «Современное материаловедение», Москва, Россия, 16-17 ноября 2020, С. 62-64.
3. Диаманы на основе муарового бислойного графена: моделирование структуры и свойств / В. А. Демин, Л. А. Чернозатонский // Ломоносов 2021 Москва, Россия, 12-23 апреля 2021.
4. Ultrawide gap Moire diamanes: theoretical investigation / V.A. Demin, D. G. Kvashnin, L. A. Chernozatonskii // NT21: International Conference on the Science and Application of Nanotubes and Low-Dimensional Materials, Хьюстон, США, 6-11 июня 2021, NT2181.
5. Ab-initio моделирование диаманов на основе малослойного муарового графена / В. А. Демин, Д.Г. Квашнин, Л. А. Чернозатонский // Современная химическая физика, XXXIII Симпозиум, Туапсе, Россия, 24 сентября– 4 октября, 2021. С. 213.
6. Моделирование структуры и свойств диаманоподобных пленок на основе бислоев из графена и нитрида бора / В. А. Демин, Л. А. Чернозатонский // IV Материаловедческий форум, Улан-Удэ, Россия, 1-7 июля, 2022. С. 68.
7. Квантово-химическое моделирование структуры и свойств диаманоподобных структур из монослоев графена и h-BN / В. А. Демин, Л. А. Чернозатонский // Четвертая российская конференция «ГРАФЕН: МОЛЕКУЛА И 2D-КРИСТАЛЛ», Новосибирск, Россия, 14-18 августа, 2023. С. 79.
8. DFT моделирование широкозонных муаровых диаманов / В. А. Демин, Д.Г. Квашнин, Л. А. Чернозатонский // 66-й Всероссийская научная конференция МФТИ, Долгопрудный, Россия, 1-6 апреля 2024. С. 346.
9. DFT моделирование структуры и свойств муаровых H/F диаманов / В. А. Демин, Д.Г. Квашнин, Л. А. Чернозатонский // Нанотехнологии и наноматериалы: современное состояние и перспективы развития, Волгоград, Россия, 25-26 апреля, 2024. С. 20.
10. Влияние гидрирования и фторирования на структуру и свойства муарового биграфена / В. А. Демин, Д.Г. Квашнин, Л. А. Чернозатонский // Международная конференция Наноуглерод и Алмаз, Санкт-Петербург, Россия, 1 - 5 июля, 2024, P3-3-36.
11. DFT study of diamane-like structures based on twisted bilayers / V.A. Demin, D. G. Kvashnin, L. A. Chernozatonskii // Конференция им. В.А. Фока по теоретической, квантовой и вычислительной химии, Великий Новгород, Россия, 30 августа - 4 сентября 2024. С. 2452.

Личный вклад

Демин В.А. является высококвалифицированным научным работником, владеющим современными методами квантовой химии. Его личный вклад в разработку идей и результатов представленной к защите диссертации является определяющим. Все расчеты были выполнены лично автором. Постановка задач, выбор методик расчета осуществлялась непосредственно автором и обсуждалась с научным руководителем.

Достоверность результатов проведенных исследований не вызывает сомнений и обеспечивается тщательным обоснованием выбранных методов и моделей, что подтверждается совпадением тестовых данных с результатами других теоретических работ в условиях их применимости. Принятые в работе допущения и ограничения обоснованы и отражены в полном объеме.

Постановили

Рекомендовать диссертацию Виктора Александровича ДЕМИНА к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 - Физическая химия (физико-математические науки).

Заключение принято на расширенном семинаре Отдела электрофизики органических материалов и наноструктур ИБХФ РАН (протокол № 1 от 29 мая 2025 г.). На семинаре присутствовали 23 человека, из них 8 докторов наук и 15 кандидатов наук. Результаты голосования: «за» — 23, «против» — нет, «воздержались» — нет.

Заведующий отделом электрофизики
органических материалов и наноструктур
ИБХФ РАН,
доктор физико-математических наук

В. Я. Кривнов

секретарь семинара
старший научный сотрудник,
кандидат физико-математических наук

В.В. Атражев