

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

О соответствии диссертационной работы «Моделирование структуры и электронных свойств новых муаровых и квазикристаллических алмазов»

Демина Виктора Александровича профилю диссертационного совета Д 24.1.038.02 и требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям

Комиссия в составе д.ф.-м.н., доц. Квашнина Дмитрия Геннадьевича; д.ф.-м.н. Шевалеевского Олега Игоревича; д.ф.-м.н., доц. Маслова Михаила Михайловича, констатирует, что диссертационная работа «Моделирование структуры и электронных свойств новых муаровых и квазикристаллических алмазов» по теме, постановке задач, методам исследования и полученным результатам соответствует специальности 1.4.4. Физическая химия (физико-математические науки).

Комиссия отмечает следующие **основные научные результаты** диссертационной работы и ее **новизну**:

1. Гидрирование/фторирование муаровых биграфенов и бислоев графен/нитрид бора приводит к образованию алмазов, структура которых существенно отличается от алмазов на основе бислоев в AA- и AB-упаковках, что приводит к изменению ширины их запрещенной зоны и энергий образования, которые зависят от муарового угла и типа адсорбированных атомов.
2. Предложен механизм формирования алмазоподобной структуры из малослойного графена со специфическими упаковками слоев 000 и 0000, а также алмазоподобного кристалла из графита 0000. Детально описана их структура и показано наличие запрещенной зоны.
3. Квазикристалл биграфена также может являться основой для алмазоподобной структуры - квазикристалла алмаза, описываемого реконструированной схемой Стэмпли, имеющей симметрию шестого порядка. Приведена оценка величины ширины запрещенной зоны для гидрированного и фторированного квазикристаллов на основе расчетов кластеров и аппроксимантов.
4. Проведено исследование алмазоподобных структур на основе бислоев графен/нитрид бора на примере гидрированных и фторированных бислоев с учетом несоответствия решеток графена и нитрида бора. Показана высокая стабильность фторированных структур и наличие запрещенной зоны 2.5-3.1 эВ.

Приведенные результаты получены впервые.

Достоверность полученных результатов обеспечивалась использованием современных программных пакетов, реализующих общепринятые методы квантовой химии, обоснованностью построенных моделей, а также сравнением полученных данных с доступными результатами, опубликованными другими научными группами.

Практическая и научная значимость результатов диссертационной работы

Работа посвящена теоретическому исследованию новых двумерных углеродных материалов – диаманов, на основе свернутых би- и малослойных графенов, а также бислоев графен/нитрид бора. При адсорбции легких атомов на поверхности бислоя происходит образование межслоевых связей и, таким образом, все атомы углерода меняют гибридизацию с sp^2 на sp^3 . Это исследование открывает новый класс квазидвумерных кристаллических материалов, основой которых могут являться различные муаровые бислойные и малослойные материалы. Предсказание новых материалов, описание их структуры, определение возможности существования, моделирование свойств и их изменение в зависимости от различных модификаций являются необходимым шагом для разработки методик их экспериментального получения и применения, что определяет практическую и научную значимость результатов данной работы.

Основные результаты диссертационной работы изложены в статьях автора, опубликованных в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК РФ:

1. L.A. Chernozatonskii Ultrawide-bandgap Moiré diamanes based on bigraphenes with the twist angles $\Theta \sim 30^\circ$ / L.A. Chernozatonskii, V.A. Demin, D.G. Kvashnin // Applied Physics Letters. – 2020. – V. 117, № 253104.
2. L.A. Chernozatonskii Fully Hydrogenated and Fluorinated Bigraphenes–Diamanes: Theoretical and Experimental Studies / L.A. Chernozatonskii, V.A. Demin, D.G. Kvashnin // C. – 2021. – V. 7, № 17.
3. L.A. Chernozatonskii Diamane quasicrystals / L.A. Chernozatonskii, V.A. Demin, A.G. Kvashnin, D.G. Kvashnin // Applied Surface Science. – 2022. – V. 572, № 151362.
4. L.A. Chernozatonskii Diamond-Like Films from Twisted Few-Layer Graphene / L.A. Chernozatonskii, V.A. Demin // JETP Letters. – 2022. – V. 115, P. 161-166.

5. Demin, V.A. Diamane-like Films Based on Twisted G/BN Bilayers: DFT Modelling of Atomic Structures and Electronic Properties / V.A. Demin, L.A. Chernozatonskii, // Nanomaterials. – 2023. – V. 13, № 841.

Помимо данных публикаций, автором опубликованы тезисы 11-ти докладов российских и международных конференций.

Публикации основных научных результатов диссертации соответствуют требованиям пунктов 11 и 13 «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждено Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842 с изменениями Постановления Правительства РФ от 21.04.2016 г. № 335, в ред. Постановления Правительства РФ от 01.10.2018 г. № 1168).

Диссертация Демина В.А. отвечает требованиям пунктов 9, 14 «Положения о присуждении ученых степеней» (утверждено Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842, в ред. Постановления Правительства РФ от 01.10.2018 г. № 1168).

Диссертация не содержит заимствованных материалов и результатов без ссылок на авторов и источники заимствования. В диссертации даны ссылки на результаты работ, выполненных Деминым В.А. в соавторстве с д.ф.-м.н. Чернозатонским Л.А., д.ф.-м.н. Квашниным А.Г. и д.ф.-м.н. Квашниным Д.Г.

На основании вышеизложенного комиссия рекомендует диссертационному совету Д 24.1.038.02 принять к защите диссертационную работу Демина Виктора Александровича «Моделирование структуры и электронных свойств новых муаровых и квазикристаллических алмазов» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Комиссия рекомендует утвердить в качестве официальных оппонентов:

- доктора физико-математических наук **Гришина Максима Вячеславовича**, заведующего лабораторией химической физики наноструктур, заведующего отдела кинетики и катализа, заместителя директора по научной работе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова

Российской академии наук»;

- кандидата физико-математических наук, **Попова Андрея Михайловича**, старшего научного сотрудника лаборатории спектроскопии наноструктур Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт спектроскопии Российской академии наук (ИСАН);

В качестве ведущей организации – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

Председатель комиссии

д.ф.-м.н., доцент



Квашнин Д.Г.

Члены комиссии:

д.ф.-м.н.



Шевалеевский О.И.

д.ф.-м.н., доцент



Маслов М.М.