

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.038.02,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТА БИОХИМИЧЕСКОЙ
ФИЗИКИ ИМ. Н.М. ЭМАНУЭЛЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК,
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 05.11.2025 № 5

О присуждении Демину Виктору Александровичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Моделирование структуры и электронных свойств новых муаровых и квазикристаллических алмазов» по специальности 1.4.4 Физическая химия принята к защите 16.07.2025 (протокол заседания № 3) диссертационным советом 24.1.038.02, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук по адресу: 119334, Российская Федерация, г. Москва, ул. Косыгина, д. 4; приказ Министерства науки и высшего образования российской федерации (минобрнауки России) № 878/нк от 25 сентября 2024 года.

Соискатель Демин Виктор Александрович, 04 июля 1988 года рождения, в 2011 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Сибирский федеральный университет» по специальности «Физика конденсированного состояния» с квалификацией инженер-физик. С 15 июля 2011 года по 15 июля 2015 года обучался в аспирантуре Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института биохимической физики им. Н. М. Эмануэля Российской академии наук по специальности 1.4.4 (02.00.04) Физическая химия. С 2011 года по настоящее время работает в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук. С 2015 года в Лаборатории акустической микроскопии в должности научного сотрудника.

Диссертация выполнена в Лаборатории акустической микроскопии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук.

Научный руководитель - доктор физико-математических наук, профессор **Чернозатонский Леонид Александрович**, главный научный сотрудник Лаборатории акустической микроскопии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

Гришин Максим Вячеславович, доктор физико-математических наук, заместитель директора по научной работе Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)

Попов Андрей Михайлович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Лаборатории спектроскопии наноструктур Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института спектроскопии Российской академии наук (ИСАН)

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация - Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» (МФТИ, Физтех, Московская обл., г. Долгопрудный) в своем положительном заключении, составленном директором Центра фотоники и двумерных материалов, доктором физико-математических наук Большаковым Алексеем Дмитриевичем и утвержденном проректором по научной работе Баганом Виталием Анатольевичем, отмечает актуальность, научную новизну и практическую значимость работы, в которой впервые изучаются диаманоподобные структуры, основой которых является свернутый бислойный и малослойный графен, а также бислой нитрид бора/графен. Построены модели муаровых диаманов с различной функционализацией, произведена оценка их электронных свойств и стабильности. Предложена схема формирования диаманов на основе малослойного графена со специфическими упаковками слоев 000 и 0000, позволяющая получить новую полностью sp^3 -гибридизованную структуру.

Также впервые было проведено моделирование и описание структуры диамана из квазикристалла биграфена, сделана оценка величины его запрещенной зоны на основе расчетов кластеров и аппроксиманта. Показана возможность существования диаманоподобных материалов на основе бислоя графен/нитрид бора. Ранее гибридные диаманы графен/нитрид бора были рассмотрены только из несвернутых бислоев или

свернутые, но без учета их несоразмерности. Однако ее учет приводит к образованию совершенно иных по структуре материалов, модели которых были построены впервые. Показано, что величина запрещенной зоны зависит от функционализации, угла поворота и схемы межслоевого соединения.

Достоверность полученных результатов не вызывает сомнений и основана на обоснованности построенных моделей, соблюдением пределов применимости используемых моделей и приближений, а также сравнением полученных рассчитанных данных с доступными результатами других научных групп.

Выводы соответствуют поставленным в работе цели и задачам и отражают результаты проведенных исследований.

Диссертационная работа Демина Виктора Александровича «Моделирование структуры и электронных свойств новых муаровых и квазикристаллических диаманов» является законченным научно-квалификационным трудом, содержит значимые результаты теоретического и практического характера. Диссертация полностью соответствует требованиям, изложенным в п. 9-14 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в действующей редакции), а её автор, Демин Виктор Александрович, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Материалы диссертации представлены в виде устных и стендовых докладов на российских и международных научных конференциях. Основные положения работы изложены в 16 научных публикациях, из них 5 статей в зарубежных и отечественных рецензируемых научных журналах.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

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.

На автореферат диссертации поступило два отзыва

- 1) отзыв к.ф.-м.н. Куркиной Ирины Ивановны, старшего научного сотрудника лаборатории «Графеновые нанотехнологии» Физико-технического института, зам. Директора по науке ФТИ, СВФУ. В качестве замечаний была отмечена необходимость упомянуть потенциальные экспериментальные методы, которые могут подтвердить предсказанные свойства и структуры, а также провести анализ влияния различных дефектов на свойства алмазов в реальных условиях.
- 2) отзыв к.х.н. Возняковского Алексея Александровича, старшего научного сотрудника в лаборатории фотоприемников на квантовых точках Федерального государственного бюджетного учреждения науки “Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук”. В качестве замечания отмечена некоторая небрежность в определении ряда графеновых наноструктур.

В отзывах отмечено, что тема диссертации является крайне актуальной, полученные в работе результаты имеют как теоретическую, так и практическую значимость в области исследований новых алманоподобных материалов. Результаты и выводы работы соответствуют поставленным задачам, их достоверность не вызывает сомнений.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обоснован их специализацией по тематике настоящей диссертационной работы и достижениями в области теоретического и экспериментального материаловедения, а также наличием публикаций в соответствующей сфере исследования, что позволяет им оценить теоретическую и практическую значимость диссертации.

Оппонент д.ф.-м.н. Гришин Максим Вячеславович является ведущим специалистом в области исследований взаимодействий молекул водорода и кислорода с металлическими наночастицами на углеродных подложках. Оппонент к.ф.-м.н. Попов Андрей Михайлович является специалистом в области моделирования углеродных наноструктур, в том числе муаровых бислоев графена.

Выбор ведущей организации - Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» (МФТИ, Физтех, Московская обл., г. Долгопрудный) обоснован тем, что входящий в его состав Центр фотоники и двумерных материалов является одним из ведущих российских научно-исследовательских центров в области исследования наноматериалов. Он состоит из десяти лабораторий, занимающихся широким кругом как экспериментальных, так и теоретических задач. Основными направлениями являются «Нанопотоника и квантовые технологии», «Микро- и наноэлектроника», «Цифровое материаловедение» и «Оптоэлектроника».

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана научная концепция, позволяющая строить модели диаманоподобных структур на основе гексагональных бислойных и малослойных материалов. Адсорбция легких атомов на их поверхность и межслоевое связывание приводит к образованию sp^3 -структуры. Причем бислои могут быть как муаровые и квазикристаллические графеновые, так и гибридные графен/нитрид борные, при рассмотрении которых важен учет несоизмерности слоев;

показана энергетическая стабильность всех рассмотренных структур, а также динамическая стабильность муаровых диаманов;

предложена схема образования алмазоподобных структур из муаровых малослойных графенов в упаковках 0000 и 000 . Согласно нее при нечетном числе слоев графита необходимо начинать гидрирование со стороны 00 для формирования полностью sp^3 -структуры и для предотвращения образования АА-диамана;

показано, что все рассмотренные диаманоподобные структуры на основе графенов имеют широкую запрещенную зону, величина которой зависит от покрывающих их атомов. Для оценки величины запрещенной зоны квазикристалла диамана использовались результаты расчетов кластеров и аппроксимантов.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

данная работа посвящена теоретическому исследованию новых двумерных материалов — диаманов, на основе би- и малослойных графенов, а также бислоев графен/нитрид бора с повернутыми слоями. Значимость исследований заключается в расширении представлений о том, какие материалы могут быть взяты за основу для получения диаманов и подобных им структур.

В работе подробно изложены методы построения моделей диамановых структур на основе би- и малослойных гексагональных материалов используя комплекс существующих методов исследования, рассчитаны их энергетические характеристики, фононные и электронные зонные структуры, а также плотности электронных состояний.

Показано, что учет несоразмерности слоев графена и нитрида бора приводит к образованию диаманоподобного материала с совершенно новой структурой, существенно отличающейся от ранее рассмотренных АВ и АВ' гибридных G/BN диаманов.

Это исследование открывает новый класс квазидвумерных кристаллических материалов, основой которых могут являться различные бислои, к примеру нитриды бора и алюминия, силицен и другие.

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

- показано, что фторирование – наиболее предпочтительный способ получения муаровых диаманов;
- установлено, что хлорирование не позволяет получить полностью sp^3 -гибридизованную структуру муарового диамана;
- представлена схема возможного получения диаманов на основе малослойного свернутого графена в специфических упаковках 0000 и 000.
- предсказана структура квазикристалла диамана, проведены описание его структуры и оценка величины запрещенной зоны

Личный вклад соискателя состоит в:

- непосредственном получении основных результатов диссертационного исследования;

- выборе методик расчета;
- активном участии во всех стадиях выполнения работ — от постановки задачи до написания статей и представлении результатов исследований на конференциях и семинарах. Постановка задач, обсуждение результатов, публикация основных результатов диссертационной работы проводились совместно, и в соавторстве, с научным руководителем. В совместных работах вклад автора в результаты исследований является определяющим.

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.

Диссертационная работа Демина Виктора Александровича «Моделирование структуры и электронных свойств новых муаровых и квазикристаллических диаманов» является законченным научно-квалификационным трудом, содержит значимые результаты теоретического и практического характера. Диссертация полностью соответствует требованиям, изложенным в п. 9-14 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в действующей редакции).

На заседании 05.11.2025 диссертационный совет принял решение присудить Демину Виктору Александровичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 11 человек, из них 10 докторов наук по специальности 1.4.4 Физическая химия, участвовавших в заседании, из 15 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за 11, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель
диссертационного совета Д 24.1.038.02, д.ф.-м.н.



Квашнин Д.Г.

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 24.1.038.02, к.х.н.

Астахова Т.Ю

05 ноября 2025 года