

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Демина Виктора Александровича «Моделирование структуры и электронных свойств новых муаровых и квазикристаллических алмазов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия (физико-математические науки)

Диссертация Демина В.А. посвящена теоретическому исследованию новых двумерных материалов — алмазов, основой которых являются би- и малослойные графены, а также бислой графен/нитрид бора с повернутыми слоями. Работа посвящена моделированию структуры и электронных свойств новых муаровых и квазикристаллических алмазов. Актуальность выбранной темы обусловлена стремительным развитием материаловедения и нанотехнологий, где низкоразмерные материалы, такие как графен и его производные, играют ключевую роль. В автореферате подчеркивается, что алмазы, предсказанные в 2009 году и синтезированные в 2018-2019 годах, обладают уникальными свойствами, включая превосходные механические характеристики, высокую теплопроводность и широкую запрещенную зону. Эти свойства открывают широкие перспективы для их применения. Особое внимание уделяется возможности настройки свойств алмазов путем изменения типа адсорбированных атомов или модификации исходных бислоев. Исследование новых sp^3 -гибридизованных углеродных двумерных наноструктур, их стабильности и электронных свойств, является крайне актуальным для фундаментальной науки и прикладных разработок.

Научная новизна диссертационной работы Демина В.А. заключается в получении ряда принципиально новых результатов, которые существенно расширяют представления о структуре и свойствах алмазов и алмазоподобных материалов. Среди прочих впервые построены модели алмазов на основе 1) муаровых биграфенов с различными углами свертки, 2) гидрированного малослойного графена и 3) графита со специфическими упаковками слоев. Показано, что фторированные муаровые алмазы обладают наибольшей запрещенной зоной. Доказана стабильность структур, что открывает новые возможности для создания материалов с заданными свойствами. Показана возможность существования алмазоподобных материалов на основе бислоя графен/нитрид бора с учетом несоответствия слоев и определены их электронные свойства, отличающиеся от свойств составляющих. Предсказанные в работе новые структуры, описанная их атомная геометрия, показанная возможность их существования и оценка физико-химических свойств предоставляют важную информацию для понимания особенностей атомной и электронной структуры алмазов на основе муаровых бислоев графена. Полученные результаты могут служить основой для дальнейших теоретических и экспериментальных исследований в области создания материалов с уникальными характеристиками.

Предложенные схемы возможного получения алмазов из малослойного графена, а также алмазоподобных кристаллов из графита, дают ориентиры для проведения экспериментальных работ. Детальное описание структуры и электронных свойств, а также информация о стабильности различных модификаций алмазов позволяет экспериментаторам целенаправленно искать и характеризовать новые соединения, понимать, какие параметры синтеза могут влиять на конечные свойства. Разработка новых материалов с уникальными свойствами является одним из ключевых направлений обеспечения технологического суверенитета страны. Алмазы и алмазоподобные

материалы могут найти применение в высокотехнологичных отраслях, таких как микро- и оптоэлектроника, производство сенсоров. Эти области являются приоритетными для импортозамещения и создания конкурентоспособной отечественной продукции. Их превосходные механические свойства и высокая теплопроводность делают их перспективными для создания защитных покрытий и элементов, работающих в экстремальных условиях. А возможность настройки электронных свойств путем изменения угла поворота слоев и типа адатомов открывает путь к разработке материалов с заданными функциональными характеристиками для конкретных технологических задач. Вышеперечисленное демонстрирует практическую значимость диссертационной работы.

Личный вклад Демина В.А. является определяющим, что подтверждается активным участием во всех стадиях работы и самостоятельным выбором методик расчета. Результаты опубликованы в 16 работах (5 статей ВАК, 11 тезисов) среди которых есть журналы Applied Physics Letters, Nanomaterials, Applied Surface Science, что подчеркивает значимость результатов. Активная апробация на российских и международных конференциях демонстрирует открытость к дискуссии, способность представлять результаты. В целом, Демин В.А. демонстрирует профессионализм, способность к проведению самостоятельных научных исследований, что позволяет охарактеризовать его как перспективного ученого, способного внести значительный вклад в развитие Физической химии.

Хотя работа носит теоретический характер и использует передовые методы квантово-химического моделирования, упоминание о потенциальных экспериментальных методах, которые могли бы подтвердить предсказанные свойства и структуры, было бы полезным. Также реальные материалы всегда содержат дефекты и примеси, которые могут существенно влиять на их свойства. Анализ влияния различных типов дефектов (например, вакансий, примесей) на электронные и механические свойства алмазов мог бы дать полную картину их потенциального применения и стабильности в реальных условиях.

Диссертационная работа «Моделирование структуры и электронных свойств новых муаровых и квазикристаллических алмазов» представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, которая по объему выполненных исследований, актуальности и новизне результатов отвечает всем требованиям, предъявляемым к диссертационным работам, установленных пунктом 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а автор, Демин Виктор Александрович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования "Северо-Восточный федеральный университет имени М.К. Аммосова", 677000 г. Якутск, ул. Белинского, д 58, сайт www.s-vfu.ru

Старший научный сотрудник лаборатории «Графеновые нанотехнологии»
Физико-технического института, зам. директора по науке ФТИ, СВФУ,
кандидат физ.-мат. наук (01.04.07 – Физика конденсированного состояния)
Тел.: +7 968 151 0171, e-mail: i.kurkina@s-vfu.ru

08.09.2025



Куркина Ирина Ивановна

Подпись Куркиной И.И. заверяю

