

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Демина Виктора Александровича на тему: «Моделирование структуры и электронных свойств новых муаровых и кристаллических алмазов», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 -Физическая химия

Диссертационная работа Демина В.А. посвящена решению важных задач материаловедения – установлению особенностей атомной структуры и электронного строения алмазовых плёнок, представляющих собой соединенные между собой ковалентными связями слои графена, в том числе функционализированные, либо бислой графен/нитрид бора. Алмазы были обнаружены экспериментально в 2020 году. Их электронное строение может легко изменяться за счет внесения в структуру материала дефектов различного типа. Это открывает потенциально широкие перспективы применения алмазов на практике. Таким образом, актуальность темы диссертационной работы Демина В.А. не вызывает сомнений. Цель данной работы заключалась в определении особенностей структуры, стабильности и электронных свойств алмазовых пленок на основе свернутого бислойного и малослойного графена, а также бислоя графен/нитрид бора в зависимости от угла поворота слоев и типа адатомов. При этом впервые были построены модели алмазов на основе биграфенов с углами свертки 21.8° , 27.8° и 29.4° . Установлено, что гидрированные и фторированные алмазы стабильны, причем у последних ширина запрещенной зоны может достигать 4.5 эВ. Построена модель и определены строение и зонная структура алмазов на основе гидрированного трех- и четырехслойного графена. Показана возможность существования алмазоподобных материалов на основе бислоя графен/нитрид бора.

Диссертационная работа Демина В.А. состоит из Введения, 6 глав, Заключения. Во Введении обоснованы актуальность и практическая значимость работы, сформулированы ее цели и задачи, а также положения, выносимые на защиту. Первая глава посвящена обзору ранее полученных

данных о структуре и свойствах ряда углеродных структур (графена, графана, би- и малослойного графена, диамана и диаманоподобных материалов) и методах их синтеза. Вторая глава методическая и рассказывает об использованных в работе методах расчета углеродных структур. Третья и последующие главы описывают полученные в ходе исследования результаты. В третьей главе представлены данные об особенностях атомной структуры и электронного строения диаманов, образовавшихся из гидрированных, и фторированных «муаровых» биграфенов. Показано, что хлорированные диграфены не позволяют получить диаман. В четвертой главе рассмотрены результаты расчетов параметров алмазоподобной пленки на основе трех- и четырехслойного графена. Описаны структура и свойства такой пленки, а также предложен механизм формирования диамана и алмазоподобного кристалла из малослойного графена. Пятая глава посвящена подробному разбору строения квазикристаллов диамана. В результате квантово-химического моделирования определены структура и величина запрещенной зоны гидрированного и фторированного квазикристаллов диаманов. В шестой главе установлены атомная структура и электронное строение диаманоподобных кристаллов на основе муарового бислоя графен/нитрид бора. В Заключение приведены результаты, полученные в ходе работы.

Исследования выполнены на современном научном уровне с использованием апробированной методики теории функционала плотности (программный пакет VASP). Достоверность полученных результатов не вызывает сомнений. Диссертационная работа написана в хорошем научном стиле. Выводы работы полностью обоснованы. Материалы диссертационной работы опубликованы в 5 научных статьях в рецензируемых журналах и докладывались на 9 представительных научных конференциях.

У рецензента имеется ряд замечаний по тексту диссертации:

1. Хотелось бы, чтобы цель диссертации была точнее сформулирована.
2. На мой взгляд диссертация значительно выиграла, если бы автор привел обоснование выбора программы, используемой в расчетах.

3. Оценивались ли автором масштаб искажений атомной структуры свернутых графена (и алмазов) за счет изгиба? Известно, что даже небольшие искажения параметров атомной решетки углеродных материалов могут приводить к значительной перестройке их электронного строения.
4. В главе 5 ввиду невозможности исследования свойств квазикристаллов алмаза методами ТФП проведено изучение характеристик нанокластеров, вырезанных в точках 1 и 7. Чем обусловлен выбор для моделирования окрестностей именно этих точек?
5. На стр. 98 обсуждается вопрос о существовании минизон шириной 0.0014-0.0674 эВ в алмазоподобном материале на основе графена/нитрида бора. Имеет ли смысл обсуждать их существование при комнатной температуре, которой соответствует энергия электронов порядка 0.03 эВ?
6. Присутствует некоторое количество неточностей и опечаток. Например, на стр. 20 неверно дана ссылка на рис.1.3. Неверно указаны значения межслоевого расстояния в подписи к рис.1.23. Не совсем ясна фраза о направлениях цепочек графена «зигзаг» и «кресло» с ссылкой на рис. 1.5, приведенная на стр. 25. В некоторых случаях в тексте для обозначения одних и тех же структур графана одновременно используются русские и иностранные термины, например: «кресло» и «chair», «лодка» и «boat», и т.д.

Высказанные замечания не снижают общую высокую оценку диссертационной работы Демина В.А. В работе выполнен большой объем научных исследований, получены новые, оригинальные результаты. Содержание автореферата полностью отражает суть диссертационной работы. Опубликованные работы содержат основные результаты работы.

Диссертация соответствует требованиям п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением

Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842 (в действующей редакции). Представленная диссертация является законченной научно-квалификационной работой, в которой решается задача определения свойств новых материалов на основе графена. Автор диссертации Демин Виктор Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Официальный оппонент:

Максим Вячеславович Гришин

доктор физико-математических наук,

Место работы: Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)

Должность: заместитель директора по научной работе

Почтовый адрес: 119991, г. Москва, ул. Косыгина, д.4, корп.1

Телефон: +7 (499) 137-82-73

E-mail: grishin@chph.ras.ru



М.В. Гришин

« 08 » октября 2025г.

Подпись заместителя директора по научной работе Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук Гришина М.В. заверяю:

учёный секретарь, к.ф.-м.н.



М.Г. Михалёва

« 08 » октября 2025г.

Адрес: Россия, г. Москва, ул. Косыгина, д.4, корп.1

Тел.: +7 499 137-29-51; +7 495 939-72-03

E-mail: icp@chph.ras.ru