ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию

Демина Виктора Александровича

на тему: «Моделирование структуры и электронных свойств новых муаровых и кристаллических диаманов», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия

Актуальность темы исследования

Диссертационная работа Демина В.А. посвящена квантово-химическому моделированию новых структур — муаровых и квазикристаллических диаманов, диаманоподобных структур графен/нитрид бора. Важность исследования заключается в предсказании атомной структуры и установлении закономерностей между строением и свойствами еще не полученного материала. Диаманы на основе бислоя графена в АА-упаковке были предсказаны в 2009 году и синтезированы спустя десять лет путем гидрирования и фторирования би- и малослойного графенов. Свойства диаманов зависят от таких параметров, как тип функционализации и строение исходного бислоя. В диссертационной работе предлагается в качестве основы для диаманоподобных материалов использовать муаровые и квазикристаллические бислои графена или бислои графен/нитрид бора. Такие работы ранее не проводились. Тема диссертации Демина В.А. является актуальной для разработки методов синтеза таких типов диаманов.

Научная новизна работы

Диссертация В.А. Демина обладает существенной научной новизной. В работе впервые приведены модели гидрированных, фторированных и Янус муаровых диаманов на основе бислоев графена с различными углами поворота слоев друг относительно друга, показана их стабильность, построены электронные зонные структуры. Показана невозможность

получения полностью sp^3-гибридизованного хлорированного муарового диамана, что отличает их от ранее исследованных AB-диаманов. Предложен метод формирования диаманов на основе гидрированного малослойного графена со специфическими упаковками слоев 0θθ и 0θθ0, а также алмазоподобного кристалла на основе графита с упаковкой слоев 0θθ0. Впервые построена модель и мозаика квазикристаллического диамана и проведена оценка величины его запрещенной зоны на основе расчетов плотностей электронных состояний квазикристаллических кластеров и аппроксиманта. Также впервые рассмотрена возможность существования диаманоподобных материалов на основе муарового бислоя графен/нитрид бора с учетом несоразмерности решеток.

Теоретическая и практическая значимость работы

Приведенные в диссертации результаты показывают связь атомарной структуры со свойствами новых диаманоподобных материалов. Предсказание новых материалов, описание их структуры, определение возможности существования, моделирование свойств и их изменение в зависимости от различных модификаций являются крайне полезными для будущего их экспериментального получения и применения.

Работа В.А. Демина имеет и практическую значимость. В работе приведены, например, схемы образования диаманов на основе трех- и четырехслойного муаровых графенов, которые могут быть использованы при возможном синтезе такой структуры. Также показано, что полностью sp^3-гибиридизованную структуру из муарового бислоя графена невозможно получить путем хлорирования.

Стоит отметить, что эксперименты по синтезу и характеризации материалов сложны и дорогостоящи. Приведенные результаты могут быть полезны при интерпретации экспериментальных данных или стать основой для проведения синтеза.

Общая характеристика и содержание диссертации

Диссертационная работа В.А. Демина построена по обычному для кандидатских диссертаций плану и включает следующие разделы: введение, две обзорные главы, посвященные теоретическим и экспериментальным достижениям в исследованиях графена и его алмазоподобных производных, четыре главы с результатами, заключение, а также список цитируемой литературы.

Обзор литературы состоит из двух глав. Первая посвящена краткому описанию углеродных sp^2-структур — графену и бислоям графена, и более подробному их sp^3-гибридизованным производным — графану и диаманам. Во второй главе приведены основные положения теории функционала электронной плотности, использованной в качестве основного метода выполнения работ. Обзор достаточно подробен, поставленные перед диссертантом задачи, логично из него вытекают.

Каждая из следующих четырех глав посвящена диаманоподобным структурам на основе разных двумерных структур: муаровых бислоев графена, малослойных муаровых графенов, квазикристаллических муаровых графенов и бислою графен/нитрид бора. Большое внимание уделено описанию атомной структуры, приведены оценки стабильности, величины запрещенных зон в зависимости от структуры, предложены механизмы образования.

В заключении приведены возможные применения рассмотренных диаманоподобных структур и сформулированы выводы.

В процессе выполнения диссертационной работы В.А. Деминым была показана возможность существования предложенных новых наноструктур, рассчитаны и проанализированы свойства. Полученные данные показывают, что поворот слоев может быть использован как еще один параметр для настройки свойств наноматериалов, а также могут быть использованы при интерпретации экспериментальных работ. Таким образом, можно сделать заключение, что рассматриваемая диссертация соответствует заявленной специальности: 1.4.4. – Физическая химия.

Замечания

К рассматриваемой диссертации можно высказать несколько замечаний.

В работе присутствуют стилистические неточности и опечатки. Например, в нумерации разделов присутствуют два раздела 5.2.

Использование термина «энергия формирования» некорректно, его следует заменить на «энергия образования»

Нет единообразия в использовании терминов, например, такие наборы синонимов как «биграфен», «бислой графена», «бислойный графен» или «свернутые слои», «угол свертки», «угол поворота» и т.д.

В работе рассмотрены диаманы на основе соизмеримых муаровых бислоев графена с наименьшими ячейками. Интересно исследовать, как будет происходить связывание слоев и адсорбция атомов при формировании диамана на основе бислоя графена с большим размером ячеек.

Удобнее было бы ввести номенклатуру соизмеримых муаровых диаманов на основе целых чисел — индексов исходных бислоев графена, а не на основе углов поворота слоев в таких бислоях.

Отмеченные замечания не снижают общую положительную оценку диссертационной работы Демина В.А.

Заключение

Диссертация Демина Виктора Александровича «Моделирование структуры и электронных свойств новых муаровых и кристаллических диаманов», представленная на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, является законченной научно-квалификационной работой, в которой изучены особенности структуры и свойств алмазоподобных структур на основе бислоев графена, малослойных графенов и бислоев графен/нитрид бора и имеет важное значение для современного материаловедения. Результаты, полученные диссертантом, достоверны, выводы обоснованы.

Полученные результаты изложены в печатных работах, опубликованных в российских и международных научных журналах, рекомендованных ВАК РФ, и неоднократно докладывались на представительных научных конференциях.

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). Автор диссертации Демин Виктор Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия.

Официальный оппонент:
Попов Андрей Михайлович
кандидат физико-математических наук,
Место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт спектроскопии Российской академии наук (ИСАН)
Должность: старший научный сотрудник лаборатории спектроскопии наноструктур
Почтовый адрес: 108840 г. Москва, г. Троицк, ул. Физическая, 5
Телефон: +7(495) 851-08-81
E-mail: popov-isan@mail.ru

16 октября 2025г. _____А.М. Попов

Подпись Попова А.М. заверяю:
учёный секретарь ИСАН, к.ф.-м.н. _____Р.Р. Кильдиярова
16 октября 2025г.

Адрес: 108840 г. Москва, г. Троицк, ул. Физическая, 5
Тел.: +7 (495) 851-0221
E-mail: isan@isan.troitsk.ru
Web-сайт организации: https://isan.troitsk.ru