



УТВЕРЖДАЮ

Заместитель директора по науке
ИБХФ РАН

д.х.н. Трофимов А.В.

2025 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля
Российской академии наук (ИБХФ РАН)

на диссертацию **Варламовой Любови Александровны**

«Исследование особенностей образования квазидвумерных наноструктур при
химически индуцированном фазовом переходе»,

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-
математических наук по специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного
состояния»

Современные достижения в области нанотехнологий и материаловедения стимулируют интенсивные исследования двумерных углеродных материалов, обладающих уникальными электронными, механическими и химическими свойствами. В этом контексте создание и исследование сверхтонких алмазных пленок (диаманов) представляет собой важное направление, открывающее перспективы для разработки новых защитных покрытий и функциональных элементов нанoeлектроники.

Диссертация Варламовой Любови Александровны посвящена изучению химически индуцированных фазовых переходов в квазидвумерных углеродных наноструктурах, в частности процессам формирования диамана из многослойного графена. **Актуальность** работы обусловлена необходимостью разработки методов синтеза стабильных сверхтонких алмазных пленок, а также понимания и теоретического описания механизмов нуклеации и стабилизации таких структур при различных внешних воздействиях.

Научная новизна работы заключается в теоретическом предсказании и описании ряда явлений, ранее не исследованных. Впервые подробно рассмотрено влияние топологических дефектов (вакансий, дефектов Стоуна-

Уэйлса) на процесс нуклеации алмазной фазы в двухслойном графене, исследована возможность образования сверхтонких алмазных пленок, пассивированных различными функциональными группами, а также изучено влияние электрического поля на стабильность диамановых кластеров. В работе предложены новые подходы к синтезу диамана на металлических подложках, что существенно снижает энергетические барьеры и давление, необходимое для формирования алмазной фазы. Такие результаты открывают новые перспективные методы синтеза сверхтонких алмазных пленок, что доказывает **практическую значимость** полученных результатов.

Во **введении** кратко описаны двумерные алмазоподобные углеродные пленки и процесс химически индуцированного фазового перехода как способа их синтезировать и стабилизировать. После чего обоснована актуальность темы, сформулированы цели и задачи исследования, представлена научная новизна, положения, выносимые на защиту, а также раскрыта теоретическая и практическая значимость работы.

Первая глава представляет собой литературный обзор современных исследований в области двумерных углеродных материалов, их механических и электронных свойств, и методов их модификации для расширения областей потенциального применения. Так же в главе подробно описаны экспериментальные работы по получению диамановых пленок и предложенные ранее теоретические модели для их описания.

Вторая глава посвящена методам компьютерного моделирования, описаны подход теории функционала плотности (DFT) и метод приближения сильной связи (DFTB), а также описан расчет химических потенциалов газообразных молекул для различных давлений и температур.

Третья глава посвящена изучению влияния структурных дефектов (вакансий, агломератов вакансий и дефекта Стоуна–Уэйлса) на процессы нуклеации алмазной фазы в биграфене. Было показано, что наличие дефектов существенно снижает энергетический барьер сорбции водорода, способствуя формированию межслоевых углерод-углеродных связей и началу роста алмазного ядра. Особенно заметно влияние вакансионных дефектов, которые позволяют инициировать процесс при минимальном числе сорбированных атомов водорода, причем с очень высокой энергией связи. Показана возможность формирования границы раздела между углеродными пленками со структурой кубического и гексагонального алмаза за счёт гидрирования цепочки 5-7 дефектов в биграфене.

Четвёртая глава содержит результаты исследования оксидных диаманов и диаманов со смешанным покрытием, а также влияния различных функциональных групп на их стабильность. Был изучен диапазон термодинамической устойчивости таких структур. Помимо этого, были рассмотрены янусовые структуры и показано, что стабильными являются лишь лонсдейлитовые пленки с пероксидным и водородным покрытиями. Особое внимание уделено моделированию пленки,

экспериментально полученной из биграфена, расположенного на подложке лангасита с использованием полиметилметакрилата, и исследована ее стабильности в электрическом поле.

В пятой главе изучено формирование сверхтонких алмазных пленок на металлических подложках. Показано, что использование Ni(111) и Pt(111) существенно снижает давление синтеза за счёт совпадения параметров решёток и сильного химического взаимодействия металла с углеродом. Особый интерес представляет предложенный метод формирования диамана без внешнего давления при использовании атомарного водорода, растворённого в платине, что делает процесс термодинамически выгодным. Представлены зависимости энергий образования sp^3 -гибридизованной углеродной пленки на различных подложках от приложенного давления, подробно рассмотрены механизмы взаимодействия и перехода биграфена в алмазную фазу.

Диссертационная работа хорошо структурирована и объединяет большой объем связанных экспериментальных и теоретических результатов. В целом диссертация производит хорошее впечатление и не имеет критических недостатков, которые могли бы препятствовать ее успешной защите. Однако по тексту диссертационной работы имеются следующие замечания:

1. В главе 3 недостаточно подробно описан процесс верификации набора параметров, используемых при расчете энергий методом приближения сильной связи.
2. Несмотря на комплексное описание процесса химически индуцированного фазового перехода с термодинамической точки зрения, в работе отсутствует анализ кинетических характеристик этих процессов. Поскольку практическая реализация синтеза во многом определяется скоростью реакции и преодолением кинетических барьеров, включение таких исследований позволило бы более всесторонне оценить возможность экспериментального получения диамана и дополнительно повысить прикладную значимость работы.
3. В работе отсутствует сравнительный анализ углеродных пленок с другими двумерными материалами, что затрудняет полное понимание их преимуществ и места среди современных наноструктур.

Указанные замечания носят рекомендательный характер и не умаляют значимости выполненной работы.

Основные работы отражены в научной печати. По материалам диссертации опубликовано пять научных статей, в изданиях из перечня ВАК, индексированных в базах данных Web of Science и Scopus. Личный вклад автора в диссертационную работу является определяющим. Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Результаты диссертационной работы обладают значительным потенциалом для применения в промышленности. Высокая твёрдость и износостойкость алмазных плёнок делают эти материалы перспективными для использования в буровом оборудовании, что представляет интерес для таких предприятий, как Тульский

НИГП(подразделение Росгеологии), Газпром и Роснефть. Кроме того, диаманты могут быть использованы при производстве компонентов для электронной, оптической и лазерной техники и будут востребованы профильными компаниями, включая НП ЗАО «СИНТА», ФГУП «СКТБ «Технолог», Гиредмет.

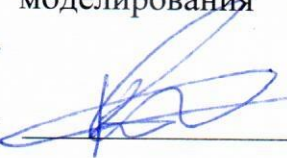
Заключение по диссертационной работе

Диссертационная работа Любови Александровны Варламовой «Исследование особенностей образования квазидвумерных наноструктур при химически индуцированном фазовом переходе» по актуальности темы, научной новизне, практической значимости результатов, обоснованности сделанных выводов, уровню исполнения и внушительной публикационной активности является законченным исследованием, содержащим решение многих важных и актуальных научных задач. Диссертация отвечает требованиям высшей аттестационной комиссии и положения о присуждении ученых степеней НИТУ МИСИС, предъявляемых к кандидатским диссертациям, а автореферат полностью и точно отражает содержание диссертации. Автор работы, Варламова Любовь Александровна, бесспорно заслуживает присуждения ей искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – «Физика конденсированного состояния».

Отзыв на диссертацию обсуждён и одобрен на расширенном научном семинаре центра «Компьютерного моделирования неорганических и композитных наноразмерных материалов» ИБХФ РАН « 24 » сентября 2025 г., протокол №3.

Отзыв подготовил д.ф.-м.н., доцент, ведущий научный сотрудник, заведующий центром «Компьютерного моделирования неорганических и композитных наноразмерных материалов».

Доктор физ.-мат. наук, доцент

 Квашнин Дмитрий Геннадьевич

Почтовый адрес: 119334, г. Москва, ул. Косыгина, д.4

Телефон: +7 (916) 236-75-35,

Адрес электронной почты: dgkvashnin@phystech.edu

Организация – место работы: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук, центр «Компьютерного моделирования неорганических и композитных наноразмерных материалов»

Должность: ведущий научный сотрудник, заведующий центром.

Web-сайт организации: <https://biochemphysics.ru>

Подпись Квашнин Д.Г. заверяю:

Ученый секретарь ИБХФ РАН

к.б.н.


Скалацкая Светлана Ивановна

Сведения о ведущей организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук

Адрес: 119334, г. Москва, ул. Косыгина, д.4

Телефон: +7(499)137-64-20

E-mail: ibcp@sky.chph.ras.ru

Web-сайт: <https://biochemphysics.ru>