

ОТЗЫВ

на автореферат 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.

Работа, представленная Варламовой Л. А., посвящена теоретическому исследованию процессов образования диаманта — двумерной углеродной плёнки с алмазоподобной структурой, формирующейся в результате химически индуцированного фазового перехода из двухслойного графена. Автор последовательно рассматривает ключевые факторы, влияющие на данный переход: структурные дефекты в исходном материале, характер и комбинацию функциональных групп, особенности используемых прекурсоров, а также воздействие внешних полей и металлических подложек.

Исследование построено таким образом, что первые главы носят вспомогательный характер, подготавливая базу для анализа основных результатов. В них кратко описаны современные представления о двумерных углеродных материалах и приведены сведения о вычислительных методах, использованных в работе. Основное внимание сосредоточено в главах с третьей по пятую, где представлены оригинальные результаты компьютерного моделирования и интерпретация его результатов.

Исследования, представленные в третьей главе, посвящены влиянию различных типов дефектов в биграфене на нуклеацию алмазной фазы. Показано, что вакансии и их агрегаты способны радикально снизить энергетические барьеры гидрирования, делая процесс зарождения диаманта термодинамически выгодным уже на ранних стадиях. Дефекты Стоуна-Уэйлса оказывают менее выраженный эффект, но также способствуют образованию межслоевых связей.

Четвёртая глава представляет собой комплексный анализ смешанных функционализированных структур, содержащих водородные, гидроксильные и пероксидные группы. Установлено, что наличие гидроксильных групп повышает термическую стабильность плёнок, а отдельные комбинации функционализации позволяют формировать устойчивые «янусовые» структуры. Рассмотрено влияние различных источников функциональных групп на термодинамические пределы стабильности плёнок. Также теоретически обоснована возможность использования лангасита и полиметилметакрилата в качестве альтернативных источников

пассивирующих групп, а также показано, что электрическое поле может эффективно изменять стабильность алмазовых кластеров и, как следствие, всей углеродной пленки.

В пятой главе представлено моделирование синтеза алмаза на металлических подложках. Показано, что применение поверхностей Ni(111) и Pt(111) позволяет существенно снизить давление, необходимое для перехода sp^2 -гибридизованной пленки в sp^3 -гибридизованное состояние. Кроме того, в качестве перспективного источника водорода для пассивации биграфена и инициирования фазового перехода предложено использовать раствор атомарного водорода в платине.

Практическая значимость работы заключается в том, что выявленные закономерности и предложенные механизмы фазового перехода могут быть использованы при разработке технологий синтеза сверхтонких алмазоподобных покрытий и функциональных наноматериалов с управляемыми свойствами, востребованных в нанoeлектронике и материаловедении.

Вместе с тем при всей значимости и научной ценности проведенного исследования, следует отметить ряд недостатков:

1. В реферате не приведено сопоставление полученных результатов с литературными данными. Надежные экспериментальных работ может быть недостаточно в связи со сложностью и уникальностью материала. Как насчет теоретических работ? Такое сравнение позволило бы оценить точность прогнозов и применимость использованных методов.

2. Как и в большинстве теоретических исследований, в данной работе при моделировании процессов формирования алмаза использовались идеализированные системы, без учета влияния экспериментальных факторов, таких как загрязнения, шероховатость подложки, неравномерность пассивации поверхности или наличие остаточных напряжений. Это может существенно повлиять на реализацию предложенных сценариев в реальных условиях.

В целом, диссертационная работа производит впечатление целостного и завершенного исследования, в котором автору удалось связать исключительно теоретический анализ с попыткой решить актуальные прикладные задачи. Представленные результаты отличаются новизной и имеют значительный потенциал для практической реализации.

Несмотря на высказанные замечания, работа заслуживает высокой оценки, а Варламова Любовь Александровна заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния».

Доктор химических наук,
ведущий научный сотрудник научно-исследовательской
лаборатории «Материалы для зеленой энергетики»
Казанского федерального университета



Димиев Айрат Маратович
31.10.2025

420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д.18.
e-mail: AMDimiev@kpfu.ru



Димиев Айрат Маратович
31.10.2025