

ОТЗЫВ

на автореферат Варламовой Любови Александровны «Исследование особенностей образования квазидвумерных наноструктур про химически индуцированном фазовом переходе», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа Варламовой Л. А. посвящена фундаментальному теоретическому исследованию механизмов формирования диамана — двумерной углеродной плёнки с алмазоподобной структурой, возникающей в результате химически индуцированного фазового перехода из бислоя графена. Автор сосредоточила внимание на анализе роли структурных дефектов, особенностях функционализации поверхности, влиянии внешних факторов и выборе прекурсоров, что имеет важное значение для разработки эффективных методов синтеза и стабилизации таких материалов.

Первые две главы работы носят подготовительный характер, формируя необходимую теоретическую и методическую базу. В них кратко изложены современные представления о квазидвумерных углеродных системах и подробно описаны методы атомистического моделирования, использованные в исследовании (в частности, расчёты в рамках теории функционала плотности и приближения сильной связи). Эти разделы создают прочный фундамент для понимания логики и достоверности последующих результатов.

В третьей главе подробно исследовано влияние различных типов структурных дефектов в бислое графена — от моновакансий и их скоплений до дефектов Стоуна-Уэйлса и границ зёрен — на процесс зарождения алмазной фазы. Показано, что наличие вакансий существенно снижает энергетические барьеры гидрирования, делая процесс нуклеации диамана экзотермическим и термодинамически выгодным. Дефекты Стоуна-Уэйлса оказывают менее выраженное воздействие, однако способствуют формированию межслоевых связей и стабилизации промежуточных конфигураций. Эти результаты представляют ценность для понимания механизмов процесса перехода бислоя графена в алмазоподобное состояние при локальной модификации структуры.

Четвёртая глава посвящена изучению структур, функционализированных различными атомными группами, и анализу их термодинамической устойчивости. Рассмотрен широкий спектр комбинаций водородных, гидроксильных и пероксидных групп. Установлено, что наличие гидроксильных групп способствует дополнительной стабилизации плёнки при повышенных температурах за счёт образования водородных связей. Отдельное внимание уделено исследованию так называемых «янусовых» структур, в которых противоположные стороны плёнки имеют различную функционализацию. Автором было показано, что лишь отдельные комбинации, включающие пероксидные и водородные группы, могут приводить к устойчивым состояниям. В работе представлена модель формирования диамана на лангаситовой подложке, демонстрирующая возможность использования данного материала в качестве источника пассивирующих групп при синтезе алмазоподобных плёнок. Кроме того, проведено исследование стабильности алмазных кластеров в бислое графена в зависимости от величины внешнего электрического поля, что позволило выявить условия, при которых фазовый переход может быть эффективно управляем.

В пятой главе исследовано влияние металлических подложек на процесс образования диамана. Автором продемонстрировано, что использование подложек Ni(111) и

Pt(111) значительно снижает критическое давление, необходимое для перехода sp^2 -гибридизованной углеродной плёнки в sp^3 -гибридизованное состояние. Особый интерес представляет результат, согласно которому применение раствора атомарного водорода в платине позволяет инициировать фазовый переход без приложения внешнего давления, что делает данный подход крайне перспективным для практической реализации в условиях низкого энергопотребления. Эти выводы открывают новые направления в технологии получения сверхтонких алмазоподобных покрытий с регулируемыми параметрами.

Практическая значимость работы заключается в том, что полученные результаты создают теоретическую основу для разработки энергосберегающих методов синтеза алмазов и других углеродных наноструктур с управляемыми свойствами. Выявленные закономерности могут быть использованы при оптимизации технологических условий формирования сверхтвёрдых, термически и химически стабильных плёнок для микро- и наноэлектроники, сенсорных систем и защитных покрытий.

В целом, диссертация производит впечатление всестороннего и глубокого исследования, в рамках которого автор осуществляет фундаментальный теоретический анализ актуальной научной проблемы. Работа характеризуется логичностью структуры, строгостью аргументации и высоким уровнем владения современными методами компьютерного моделирования. Полученные результаты обладают значительной научной и практической ценностью.

Таким образом, Варламова Любовь Александровна заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния».


Кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник
Лаборатории спектроскопии наноструктур
федерального государственного бюджетного
учреждения науки Институт спектроскопии
Российской академии наук (ИСАН)

 Попов Андрей Михайлович
06 ноября 2025

108840 г. Москва, г.Троицк
ул. Физическая, 5
popov-isan@mail.ru

Подпись Попова Андрея Михайловича заверяю
учёный секретарь ИСАН, к.ф.-м.н.



 Р.Р. Кильдиярова
06 ноября 2025г.