

Отзыв официального оппонента

на диссертационную работу Галиахметовой Лейсан Халиловны «Устойчивость и механические свойства трехмерных углеродных наноматериалов с sp^2 и sp^3 гибридизацией», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Актуальность. В настоящее время исследование новых наноматериалов на основе углерода и его полиморфов представляется важной и актуальной задачей, поскольку развитие современной электроники требует поиска новых материалов с уникальными свойствами. Реализация всех перспектив применения полиморфов углерода требует детального исследования структуры и свойств, как известных и полученных на практике, так и теоретически предсказанных материалов с важными для практического применения свойствами. Таким образом, актуальность работы обусловлена необходимостью поиска перспективных углеродных наноструктур, теоретического исследования и предсказания их свойств без проведения дорогостоящих и затратных экспериментальных работ. С этой точки зрения, метод молекулярной динамики с правильно подобранными потенциалами межатомного взаимодействия позволяет эффективно моделировать новые углеродные структуры и исследовать их свойства, и потому является мощным инструментом для подобных исследований.

Структура диссертации. Диссертация объемом 163 страницы состоит из введения, пяти глав, заключения и списка цитируемой литературы из 202 источников.

Обзор литературы, представленный в **первой** главе диссертационной работы достаточно полно описывает задел, имеющийся по теме углеродных наноструктур, в частности, фуллеритов и углеродных алмазоподобных фаз (УАФ). Отражены уникальные свойства данных структур, исследованные теоретически и экспериментально к данному моменту. В обзоре продемонстрирована важность изучения механических свойств подобных материалов и необходимость их дальнейшего изучения.

Методы компьютерного моделирования, применяемые в данной работе, представлены во **второй** главе. Описан метод молекулярной динамики, а также применяемые для углеродных структур межатомные потенциалы. Отдельно описаны исследуемые углеродные наноструктуры и их элементарные составляющие: фуллерит (фуллерен), УАФ (фуллереноподобные молекулы, углеродные нанотрубки и графен). Стоит отметить, что для создания начальных конфигураций углеродных наноструктур, автором была написана специальная программа.

Третья глава содержит результаты численного моделирования фуллеритов на основе разных молекул фуллерена, уложенных в два типа кристаллического порядка: C_{60} с ПК и ГЦК укладками, C_{48} и C_{240} с ПК укладкой молекул. Были исследованы два аспекта: (1) проведен анализ

упругих постоянных кристаллов фуллерита в упругом режиме, и (2) изучено деформационное поведение в процессе гидростатического сжатия. Среди изученных структур были обнаружены частичные ауксетики. Фуллерит является трудноожимаемым материалом и становится прочнее с увеличением давления. Как следствие, до больших давлений фуллерит остается упруго-деформируемой средой.

Четвертая глава описывает устойчивость углеродных алмазоподобных фаз и содержит расчет констант упругости. Описаны три критерия устойчивости, которые были выделены впервые в данной работе. Продемонстрированы устойчивые фазы и проведен анализ технических констант (коэффициент Пуассона, модуль Юнга, модуль сдвига и объемный модуль). Большим плюсом является объединение результатов, полученных методом молекулярной динамики с аналитическим расчетом, что, безусловно, усиливает работу. Аналитические расчеты проводились совместно со специалистами по механике твердого тела на основе данных, полученных из атомистического расчета. Были обнаружены уникальные характеристики УАФ, такие как ауксетичность, то есть отрицательность коэффициента Пуассона, что является довольно редким свойством. Полученные для некоторых фаз значения модуля Юнга превышают известные из литературы значения для алмаза и графита. Обнаружена сильная ориентационная зависимость модуля Юнга и коэффициента Пуассона от направления приложенной деформации.

Деформационное поведение УАФ при приложении гидростатического растяжения и сжатия рассматривается в **пятой** главе. Для анализа деформационного поведения построены кривые напряжение-деформация, проанализировано изменение валентных углов и связей, а также функции радиального распределения. Было установлено, что в процессе сжатия УАФ деформация протекает за счет изменения начальных неравновесных значений ковалентных связей и углов, а на кривых может быть обнаружено плато, соответствующее переходу к аморфоподобному состоянию. В случае отсутствия плато фаза сохраняет кристаллический порядок до больших степеней сжатия. На кривых растяжение-деформация можно выделить упругий участок, а также от двух до четырех участков неупругого деформирования, последний из которых всегда характеризуется сильным падением напряжений и является предкритическим.

Наиболее важные научные результаты. Анализ кристалла фуллерита показал сильную зависимость его механических свойств от типа структурного элемента – размера фуллерена и типа его укладки в молекулярный кристалл фуллерита. Показано, что для всех фуллеритов наблюдается рост жесткости при увеличении давления, однако, даже до больших значений сжимающей деформации фуллерит остается упруго-деформируемым.

В работе проведен полный анализ механических свойств углеродных алмазоподобных фаз – от расчета констант упругости и жесткости, до анализа ориентационной зависимости технических коэффициентов упругости (модуля Юнга, коэффициента Пуассона и модуля

сдвига). Выведены критерии устойчивости, основанные на применении реалистичного межатомного потенциала и приложении малых деформаций. К ним также добавлен известный критерий Борна. Анализ УАФ в упругой области дополнен исследованием деформационного поведения и анализом механизмов растяжения и сжатия УАФ при двух температурах.

Достоверность. Достоверность результатов и основных выводов обеспечивается использованием широко известных пакетов с хорошо апробированными межатомными потенциалами. Основные результаты опубликованы в 13 печатных работах в журналах, входящих в перечень ВАК, из них 11 – в научных журналах, входящих в наукометрические базы данных Scopus и WoS.

Новизна. Впервые обнаружены структуры – частичные ауксетики среди фуллеритов. Впервые методом молекулярной динамики исследованы механические свойства и проведен полный анализ модулей упругости углеродных алмазоподобных фаз на основе фуллереноподобных молекул, нанотрубок и графена. Кроме того, впервые теоретически исследованы механизмы деформирования устойчивых УАФ в условиях гидростатического растяжения и сжатия на основе анализа параметров решетки, валентных углов и функции радиального распределения.

Практическая значимость. Предложенные автором критерии устойчивости позволяют однозначно определить УАФ, перспективные с точки зрения практического синтеза. Найденные уникальные характеристики – ауксетичность, большие значения модуля Юнга – демонстрируют УАФ, важные с точки зрения их практического применения. Таким образом на основе полученных результатов можно сформировать рекомендации для проведения соответствующих экспериментов.

Вопросы и замечания:

1. Следует отметить, что даже если результаты, полученные с помощью численного моделирования, выглядят правдоподобно, хотелось бы увидеть сравнение с реальными экспериментальными данными, например, по алмазоподобным фазам.
2. Автор сравнивает деформационное поведение УАФ при двух температурах – 0 и 300 К. Насколько оправданым является исследование при 0 К? И не является ли выбор такой температуры переходом от молекулярной динамики к молекулярной статике?
3. Почему авторы называют модули упругости «техническими константами упругости»? Ни в автореферате, ни в тексте диссертации нет соответствующих пояснений.

Отмечу, что сделанные замечания не носят принципиального характера и не снижают общей высокой оценки диссертационной работы.

Общее заключение. Галиахметовой Л.Х. выполнено серьезное научное исследование по изучению углеродных алмазоподобных структур и фуллеритов различного состава в упругом и неупругом режиме, изучены свойства и механизмы деформирования. Способ изложения материала логичен и последователен. Содержание работы соответствует поставленным целям и задачам. Автор хорошо изучил соответствующую научную литературу по теме данного исследования. Обзор свойств различных углеродных наноструктур, предложенный в работе, говорит о хорошем понимании материала и способности анализировать полученные данные. Достоверность подтверждается использованием хорошо апробированных методов, а также тем, что результаты работы были опубликованы в известных российских и зарубежных журналах, а также представлены на различных конференциях. Диссертационная работа Галиахметовой Л.Х. является законченным квалификационным исследованием, а ее автор Галиахметова Лейсан Халиловна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Я, Маслов Михаил Михайлович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Официальный оппонент:

Кандидат физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, доцент, доцент Института нанотехнологий в электронике, спинtronике и фотонике ФГАОУ ВО Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» (НИЯУ МИФИ)
Адрес: 115409, г. Москва, Каширское шоссе, 31
E-mail: MMMaslov@mephi.ru
Тел.: +7 (985) 997-48-03

Маслов Михаил Михайлович

«21» апреля 2021 г.



Подпись удостоверяю
Заместитель начальника отдела
документационного обеспечения
НИЯУ МИФИ

Входящий ИПСМ
№ 233
от 26.04.2021