



УТВЕРЖДАЮ

ректор ИПСМ РАН

Р.Р. Мулюков

«*10*» *марта* 2021

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук (ИПСМ РАН)

Диссертация «Устойчивость и механические свойства трехмерных углеродных наноматериалов с sp^2 и sp^3 гибридизацией» выполнена в лаборатории 09 «Нелинейная физика и механика материалов» ИПСМ РАН.

В период подготовки диссертации соискатель Галиахметова Лейсан Халиловна работала в лаборатории 09 «Нелинейная физика и механика материалов» ИПСМ РАН в должности стажера-исследователя.

В 2016 году окончила Физико-технический институт Башкирского государственного университета по специальности «Физика».

В 2020 году окончила очную аспирантуру Института проблем сверхпластичности металлов РАН по специальности «Физика конденсированного состояния»

Научный руководитель - доктор физико-математических наук, профессор РАН Баимова Юлия Айдаровна, ведущий научный сотрудник ИПСМ РАН.

По результатам рассмотрения диссертации «Устойчивость и механические свойства трехмерных углеродных наноматериалов с sp^2 и sp^3 гибридизацией» принято следующее заключение:

Диссертация Галиахметовой Л.Х. представляет собой законченное и самостоятельное исследование.

Актуальность диссертационной работы

Развитие современной науки и новых технологий невозможно без разработки и изучения свойств новых наноматериалов. Интерес к наноматериалам на основе полиморфов углерода можно объяснить их уникальными электронными, физическими, механическими, оптическими и химическими свойствами, что делает их перспективными для будущих применений.

Существует большое количество наноразмерных углеродных sp^2 структур,

например, фуллерены, чешуйки или наноленты графена, углеродные нанотрубки (УНТ). Слабые межатомные силы Ван-дер-Ваальса, соединяющие структурные элементы, ответственны за формирование большого разнообразия трехмерных углеродных наноматериалов, таких как графит, фуллерит, системы УНТ. При больших давлениях и температурах может происходить частичная или полная полимеризация углерода sp^2 -типа, приводящая к формированию алмазоподобных фаз, содержащих углерод sp^3 -типа, которые также представляют большой интерес для практических приложений. Подобные объемные углеродные наноматериалы находят применение при создании композитов, в области хранения и транспортировки водорода, в разработке сверхтвердых покрытий, устройств получения возобновляемой энергии, в медицине, электронике и пр. Рассматриваются возможности использования данных материалов для создания суперконденсаторов или электродов в устройствах преобразования энергии. В настоящее время активно разрабатываются достаточно экономичные и экологически чистые способы получения подобных материалов. Однако перспективы их применения не могут быть полностью раскрыты без детального изучения их структуры и свойств. Представляет большой интерес изучение их физических и механических свойств, а также эволюции их структуры в ходе неупругой деформации.

Наряду с трудоемкими и дорогостоящими экспериментальными методами исследования углеродных наноматериалов активно используется компьютерное моделирование, позволяющее удешевить и ускорить их изучение и разработку. Одним из распространенных методов, используемых в исследовании углеродных материалов, является метод молекулярной динамики (МД), опирающийся на использование эмпирических межатомных потенциалов.

Изучение особенностей и совершенствование способов получения различных наноматериалов и структур с уникальными механическими и физическими свойствами является важнейшей задачей, от решения которой зависит как успешное внедрение нанотехнологий в различные области науки и техники, так и дальнейшее их развитие.

Из вышесказанного следует, что изучение различных типов объемных углеродных наноматериалов, их структурных характеристик, физических и механических свойств, а также деформационного поведения является актуальным, и может быть эффективно проведено с помощью методов МД моделирования.

В работе рассмотрено два вида объемных углеродных наноматериалов: sp^2 -структуры на основе молекул фуллерена (фуллериты) и sp^3 углеродные алмазоподобные фазы (УАФ) на основе фуллереноподобных молекул, графена и УНТ. Предметом исследования стало определение возможности существования и устойчивости различных

конфигураций углеродных материалов, а также исследование их механических свойств.

Личное участие автора в получении результатов, изложенных в диссертационной работе

Содержание диссертационной работы и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора. Все изложенные в работе оригинальные результаты получены либо автором лично, либо при его непосредственном участии. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад соискателя был определяющим.

Достоверность результатов, изложенных в диссертационной работе, обеспечена использованием современных методов исследования, хорошо апробированных не только соискателем, но и другими известными авторами, работающими в области изучения углеродных наноструктур; сравнением полученных результатов, где это возможно, с известными литературными данными; физической непротиворечивостью результатов моделирования.

Научная новизна результатов работы заключается в следующем:

1. Разработана модельная схема построения структуры углеродных материалов, состоящих из атомов углерода в sp^2 (фуллериты) или sp^3 гибридном состоянии (УАФ), на основе которой проводилось исследование их устойчивости и механических свойств.

2. Предложены критерии устойчивости УАФ на основе применения метода молекулярной динамики с реалистичным межатомным потенциалом: релаксационная и деформационная устойчивость, а также соблюдение термодинамических критериев устойчивости.

3. Найдены устойчивые конфигурации фуллеритов и УАФ путем приложения малых деформаций, проведения аналитических расчетов и анализа технических констант упругости.

4. Исследованы несколько типов трехмерных наноструктур на основе фуллеренов и фуллереноподобных молекул, УНТ и листов графена. Впервые сделан полный анализ их модулей упругости (коэффициент Пуассона, модуль Юнга, модуль сдвига и объемный модуль) в зависимости от направления приложенного растяжения.

5. Впервые установлено, что некоторые УАФ и фуллериты являются частичными ауксетиками, то есть при определенном выборе оси растяжения они показывают отрицательный коэффициент Пуассона. Среди изученных углеродных структур найдено восемь новых ауксетиков. Рассчитаны экстремальные значения модуля сдвига и модуля Юнга исследованных углеродных наноматериалов.

6. Впервые полностью описано деформационное поведение УАФ при положительном и отрицательном гидростатическом давлении. Выявлены критические значения напряжений/деформаций и рассмотрены структурные изменения в процессе деформирования устойчивых УАФ. Описаны механизмы деформации на основании анализа изменения валентных углов и длин ковалентных связей.

Теоретическая значимость данной диссертационной работы заключается в следующем:

- найдены трехмерные гибридные sp^2 - и sp^3 -наноструктуры на основе сшитых валентными связями аллотропов углерода, демонстрирующие аномальные упругие свойства, например, отрицательный коэффициент Пуассона;
- показаны новые, ранее не исследованные свойства фуллерита, а именно, найдены конфигурации с отрицательным коэффициентом Пуассона;
- показано, что среди УАФ, созданных на основе УНТ и листов графена, существуют конфигурации с отрицательным коэффициентом Пуассона;
- получены закономерности деформирования УАФ и выявлены основные структурные механизмы деформации при гидростатическом сжатии и растяжении.

Кроме того, полученные в работе результаты, позволяют подтвердить данные уже существующих теоретических исследований.

Практическая значимость работы заключается в том, что результаты, изложенные в диссертации, могут быть использованы для подготовки рекомендаций по синтезу новых углеродных алмазоподобных материалов с ранее не известными свойствами и расширению области применения УАФ.

Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем

Материалы диссертационной работы опубликованы в 13 печатных работах, из них 10 статей в журналах, входящих в перечень ВАК, а также 8 статей в сборниках трудов конференций и 20 тезисов докладов

Научная специальность, которой соответствует диссертация:

Диссертация «Устойчивость и механические свойства трехмерных углеродных наноматериалов с sp^2 и sp^3 гибридизацией» соответствует всем квалификационным требованиям пункта II положения о присуждения ученых степеней от 24 сентября 2013 года и требованиям паспорта специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, что подтверждается публикацией основных результатов в научных журналах, специализирующихся в данной области знаний, апробацией работы на соответствующих

научных конференциях и семинарах, использованными методами исследования, научной новизной и практической значимостью.

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

Заключение принято на заседании Ученого совета ИПСМ РАН.

Присутствовало на заседании 14 членов Ученого совета из 18 списочного состава. Результаты голосования «за» - 14, «против» - 0, «воздержалось» - 0, протокол № 01-21 от 19.01.2021 г.

Ученый секретарь ИПСМ РАН

к.т.н.

Сафаров Ильфат Миндигалеевич