

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.080.03

на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук (ФГБУН ИПСМ РАН) по диссертации на соискание ученой степени доктора наук

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 3 ноября 2016 г., протокол №15/16

О присуждении Баимовой Юлии Айдаровне, гражданину РФ, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Структура и физические свойства наноматериалов на основе графена» по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния» принята к защите 7 июля 2016 г., протокол № 11/16, диссертационным советом Д 002.080.03 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, адрес: 450001, г. Уфа, ул. Степана Халтурина, 39, Приказ Министерства образования и науки РФ о создании совета - № 785/нк от 10.07.2015 г.

Соискатель Баимова Юлия Айдаровна, 1987 года рождения.

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Влияние упругой деформации на механические свойства графена, его линейные и нелинейные колебательные моды» защитила в 2014 году в диссертационном совете Д 002.080.02, созданном на базе ФГБУН ИПСМ РАН.

Соискатель работает старшим научным сотрудником в лаборатории цветных сплавов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов Уральского отделения Российской академии наук, а также по совместительству старшим научным сотрудником лаборатории 09 «Нелинейная физика и механика материалов» Федерального государственного бюджетного

учреждения науки Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук.

Диссертация выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, в лаборатории 09 «Нелинейная физика и механика материалов».

Научный консультант – доктор физико-математических наук, **Дмитриев Сергей Владимирович**, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, заведующий лабораторией 09 «Нелинейная физика и механика материалов».

Официальные оппоненты:

1. **Овидько Илья Анатольевич**; доктор физико-математических наук; профессор; заведующий лабораторией Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», г. Санкт-Петербург;

2. **Косевич Юрий Арнольдович**; доктор физико-математических наук; ведущий научный сотрудник лаборатории физики и механики полимеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, г. Москва;

3. **Екомасов Евгений Григорьевич**; доктор физико-математических наук; профессор кафедры теоретической физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский государственный университет», г. Уфа.

дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет», г. Челябинск, в своем положительном заключении, подписанном

профессором кафедры физики конденсированного состояния ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет», доктором физико-математических наук **Беленковым Евгением Анатольевичем**, указала, что диссертационная работа Баимовой Ю.А. выполнена на актуальную тему и представляет собой логически выстроенную и завершенную научно-исследовательскую работу.

Соискатель имеет 96 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 51 работу, из них 50 опубликованы в рецензируемых научных изданиях из перечня ВАК РФ и в ведущих международных журналах. Пятьдесят публикаций по теме диссертации являются научными статьями и одна учебным пособием, написанными лично автором (либо при его непосредственном участии) их общий объём – 29 печатных листов.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Заведующего кафедрой общей физики Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, д. ф.-м. н., проф., заслуженного деятеля науки РФ **Старостенкова М. Д.** Отзыв положительный, без замечаний.

2. Заведующего кафедрой «Высшая математика и математическое моделирование» Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, д. ф.-м. н., проф. **Полетаева Г.М.** Отзыв положительный, без замечаний.

3. Профессора кафедры радиофизики и нелинейной динамики физического факультета ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского», д. ф.-м. н. **Четверикова А.П.** Отзыв положительный, имеется 2 замечания: **1.** Наряду с описанием объектов исследования и используемых методов анализа стоило обозначить мировой уровень исследований в данной области, основные результаты, на которых базируется работа, и их авторов; **2.** При описании результатов глав диссертации в автореферате стоило бы указать номера работ из списка публикаций автора, в которых соответствующие результаты представлены.

4. Заведующего лабораторией механики прочности и разрушения материалов и конструкций ИПМех РАН, члена-корреспондента РАН, д.ф.-м.н., проф. **Гольдштейна Р.В.**, ведущего научного сотрудника лаборатории механики жидкостей ИПМех РАН, д.ф.-м.н., проф. **Городцова В.А.** и старшего научного сотрудника лаборатории механики прочности и разрушения материалов и конструкций ИПМех РАН, к.ф.-м.н. **Лисовенко Д.С.** Отзыв положительный, имеется 2 замечания: **1.** На стр.17 сказано: «Графен в отсутствие деформации или при гидростатическом растяжении,  $\varepsilon_{xx}=\varepsilon_{yy}\neq 0$ ,  $\varepsilon_{xy}=0$  является изотропной упругой средой, ...». Но изотропность растяжения не означает упругую изотропию графена. Упругость графена относится к гексагональной сингонии, т.е. он является упруго анизотропным! **2.** На стр.17 написано: «Графен в отсутствие деформации или при гидростатическом растяжении,  $\varepsilon_{xx}=\varepsilon_{yy}\neq 0$ ,  $\varepsilon_{xy}=0$ , является изотропной упругой средой, а при негидростатическом растяжении,  $\varepsilon_{xy}=0$ ,  $\varepsilon_{xx}\neq\varepsilon_{yy}\neq 0$ , - ортотропной средой. Отметим, что при других видах деформации графен преимущественно анизотропен.». Случаю ортотропной среды по терминологии кристаллофизики соответствует орторомбическая сингония. Поэтому при негидростатическом растяжении графен является анизотропным.

5. Главного научного сотрудника лаборатории физики низкоразмерных систем ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный социально-педагогический университет», д.ф.-м.н., проф. **Крючкова С.В.** и доцента кафедры физики, методики преподавания физики и математики, ИКТ ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный социально-педагогический университет», к.ф.-м.н. **Кухаря Е.И.** Отзыв положительный, замечания отсутствуют.

6. Ведущего научного сотрудника НИО-2 «Физика прочности и интеллектуальные диагностические системы», проф. кафедры общей и теоретической физики ФГБОУ ВО «Тольяттинский государственный университет», д.ф.-м.н. **Ясникова И.С.** Отзыв положительный, имеется 2 замечания: **1.** Дефект 5-

7- 5-7, упомянутый в автореферате, является по сути дисклинационным диполем с экранированным полем упругих напряжений и не способен поменять гауссову кривизну углеродной плёнки [ФТТ, 40, 1178 (1998)] сохраняя её «плоское» состояние. Допускает ли метод молекулярной динамики прогнозирование механических свойств углеродных пленок с введенными в их структуру более сложными экранированными мультидисклинационными конфигурациями [ФТТ, 58, 1147 (2016)]? 2. Кроме того, на мой взгляд, использование термина «квазидвумерность» в случае наноматериалов на основе графена не вполне приемлемо, так как сама по себе квазидвумерность подразумевает частичную пространственную делокализацию физической системы в направлении третьего измерения (например, атомарный водород на плёнке сверхтекучего гелия). Наводораживание графена, на мой взгляд, не приводит к делокализации системы, но это скорее дискуссионный вопрос, касающийся выбора терминологии.

7. Главного научного сотрудника ФГБУН Института высокотемпературной электрохимии УрО РАН, д.ф.-м.н. **Галашева А.Е.** Отзыв положительный, 4 замечания: 1. Напрашивается пояснение к правомерности использования формулы (5) для вычисления теплоемкости графена – двумерного материала. Точнее, вопрос касается множителя  $3N$ , отражающего число фононных мод в объемном кристалле. Для кристалла с двумя атомами в базисе (как у графена) размерность динамической матрицы должна быть  $6 \times 6$ . Но моды, где колебания выводят атомы из плоскости графенового листа (out-of plane modes) отделяются и задача может быть приведена к плоской с размерностью динамической матрицы  $4 \times 4$ . Кроме того, при рассмотрении механических свойств моды «out-of-plane» для графена автором фактически не принимаются во внимание. 2. На стр.17 автореферата указывается, что при гидростатическом растяжении коэффициент Пуассона  $\nu$  графена становится отрицательным. Так как материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона способны расширяться/сужаться в направлении, перпендикулярном направлению

растяжения/сжатия, то при  $\nu < 0$ , создаваемым гидростатическим растяжением, графен становится более волнистым или шероховатым. Но данные о рифлении или шероховатости в автореферате не представлены. Хотя логично было бы сопоставить, насколько хорошо полученные для области устойчивости графена значения относительных деформаций  $\epsilon_{xx}$ ,  $\epsilon_{yy}$  согласуются с величиной атомных смещений в графене за пределы плоскости. **3.** На стр. 23 дается неверная ссылка на формулу (3), тогда как следует сослаться на формулу (4). **4.** На стр. 27, когда идет описание теплопередачи через границу двух сред, представляемых однослойной гетероструктурой силицен/графен, вместо термина «поверхность» раздела, следовало бы использовать не вводящий в заблуждение термин «граница» раздела двух сред. В последнем абзаце главы 4 на этой же странице утверждается, что «При увеличении размера системы фононные моды с большой длиной волны не могут быть возбуждены». На самом деле справедливо обратное, т.е. длина волны фононной моды (коллективного колебания атомов) увеличивается с ростом размера системы. Следовательно, следующее далее объяснение замедления роста коэффициента теплопередачи с увеличением длины слоя (рис. 10б) некорректно.

8. Доцента НИЯУ «МИФИ», к.ф.-м.н. **Катина К.П.** Отзыв положительный, имеется 3 замечания: **1.** На стр. 11 автореферата после формулы (2) ошибочно указано что  $dt$  это шаг по времени. Скорее всего, под  $dt$  подразумевается время, за которое система получает количество теплоты  $\Delta\xi$ . **2.** На стр. 12 автореферата указано, что межатомное расстояние в графене составляет  $1,45 \text{ \AA}$ . Такое завышенное значение может быть связано с недостаточной точностью используемых эмпирических потенциалов, поскольку эксперимент и *ab initio* расчеты приводят к значению  $1,42 \text{ \AA}$ . **3.** На рис. 9 (стр. 24 автореферата) на правом графике по оси  $Ox$  отложена общая длина. По всей видимости, имеется в виду не общая длина, а расстояние от края листа до точки, в которой измеряется температура. Кроме того, этот график ошибочно отмечен номером а) вместо б).

9. Заведующего кафедрой физической и неорганической химии ФГБОУ ВО Алтайский государственный университет, д.ф.-м.н. **Безносюка С.А.** Отзыв положительный, имеются 2 замечания: 1. Не смотря на то, что метод молекулярной динамики является хорошо известным и апробированным методом исследования, в автореферате не достаточно полно обосновано использование именно этого метода. Автору следует обосновать почему данные расчеты выполнены молекулярно-механическими методами, а не первопринципными квантово-механическими методами или полуэмпирическими квантово-механическими? 2. В автореферате упоминается несколько конфигураций онионов, однако остается не ясным какие именно варианты структур были рассмотрены и на чем основан выбор, например, структуры  $C_{20}@C_{80}$ , показанной на рис. 3. Следовало бы пояснить это в автореферате более подробно.

10. Заведующей кафедрой радиотехники и электродинамики ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», д.ф.-м.н., проф. **Глуховой О.Е.** Отзыв положительный, имеются 6 замечаний: 1. На стр. 10 автореферата говорится, что в диссертации приводится «подробное описание...потенциалов Бреннера, Савина и Айребо». Тем не менее, в самом автореферате не только не приводится описание данных методов, но и даже отсутствуют ссылки. Это довольно удивительно, особенно, если говорить о потенциале Савина, который не является общеизвестным в научном сообществе. Кроме того, в ходе самого автореферата не указывается, какие именно методы расчета энергетического потенциала применяются к тем или иным объектам. 2. На стр. 12 указано, что «межатомное расстояние в графене составляет 1,45Å». Насколько мне известно, общепринятым расстоянием для связи С-С в недеформированном графене является 1,42Å. Остается неясным, имеет ли здесь место банальная опечатка либо же это является следствием использованных автором методов. В любом случае, автору стоило разъяснить данный острый момент более подробно. 3. На рис.4 показано, что в области (2) коэффициент Пуассона плоского графена отрицательный. Тем не менее, из рисунка это не понятно. Например, значению относительного удлинения по оси  $x$  ( $\epsilon_{xx}$ ) 0.3 в области 2 соответствуют

значения относительного удлинения вдоль оси  $y$  ( $\epsilon_{ps} y$ ) в диапазоне  $[-0.1; 0.3]$ . Получается, что для диапазона значений  $[0; 0.3]$  коэффициент Пуассона не является отрицательным. 4. Из автореферата остается непонятным, почему автор решил так подробно рассмотреть структуру графон-зигзаг. Как видно из работы, его свойства, в частности теплопроводящие, не отличаются от свойств обычного графена. 5. Не учтено влияние топологии внешней оболочки C540 на энергетические ямы C20@C540. Как известно, фуллерен C540 относится к фуллеренам типа Гольдберга и имеет икосаэдрическую симметрию. Такие фуллерены имеют три типа потенциальных ям с различными значениями энергии: 30 потенциальных ям с энергией  $E_1$ , 12 – с энергией  $E_2$  и 20 – с энергией  $E_3$ , причем  $E_1 > E_2 > E_3$ . Автор пренебрегает этим фактором и рассматривает лишь случай, когда «C20 занимает равновесное положение в центре C540». 6. В качестве задач исследования автор называет «анализ влияния дефекта 5-7-5-7 на прочность графена на разрыв». В выводах автор отмечает, что «одиночный дефект 5-7-5-7 слабо понижает прочность графена на разрыв». Тем не менее, между разделом «задачи» и «выводы» фраза «дефект 5-7-5-7» не встречается. Остается лишь догадываться, что из себя представляет этот дефект и каким образом автор делает выводы о его влиянии на прочность графена.

11. Заведующего кафедрой общей и экспериментальной физики ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный университет», д.ф.-м.н., проф. **Плотникова В.А.** Отзыв положительный, 1 замечание: в автореферате автор слабо отражает структуру и свойства алмазоподобных слоистых структур, хотя в выводах работы упоминает об этих структурах.

12. Заведующего отделом ОИВТ РАН, д.ф.-м.н. **Стегайлова В.В.** и главного научного сотрудника ОФИВТ РАН, д.ф.-м.н., проф. **Нормана Г.Э.** Отзыв положительный, без замечаний.

В отзывах указано, что представленная работа имеет большое практическое значение и по своей новизне и актуальности соответствует требованиям ВАК к докторским диссертациям.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что они являются компетентными в данной отрасли науки, широко известны своими достижениями в данной области и способны определить научную и практическую ценность диссертации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана научная концепция управления физическими и механическими свойствами графена и наноматериалов на его основе посредством деформирования или химического модифицирования;

предложена оригинальная гипотеза разводораживания графена посредством возбуждения дискретных бризеров;

показана перспективность применения наноструктур на основе графена для создания различных устройств с улучшенными свойствами;

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказаны положения, вносящие вклад в расширение представлений об углеродных материалах в общем, и наноструктур на основе графена в частности, их структуре, свойствах и возможностях управления их свойствами;

применительно к проблематике диссертации результативно использован метод молекулярной динамики с использованием трех различных потенциалов межатомного взаимодействия;

изложены условия изменения фононного спектра графена посредством деформирования и химического модифицирования, изменения скоростей звука посредством деформирования и условия формирования корругированного графена со складками с заданными параметрами;

раскрыты возможности применения водорода для изменения физических свойств не только графена, но гетероструктур на его основе;

изучено большое многообразие двумерных и трехмерных материалов на основе графена, показаны их структурные особенности и свойства;

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработана общая методика расчета теплопроводности и теплопередачи в квазидвумерных структурах на основе графена и второго материала с решеткой, подобной решетке графена;

определены устойчивые структурные состояния для различных конфигураций слоистых структур, а также углеродных алмазоподобных фаз;

создана система практических рекомендаций по управлению параметрами одномерных складок корругированного графена;

представлены рекомендации по управлению механическими свойствами скомканного графена и некоторых других трехмерных материалов на основе графена посредством неупругой деформации.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

теоретические результаты получены с помощью как стандартных, так и специально написанных вычислительных программ, в которых были использованы хорошо апробированные межатомные потенциалы;

идеи базируются на достаточно известных подходах, например, технологии упругих деформаций, которая ранее к рассмотренным в диссертации материалам не применялась, а также на экспериментальных данных по уже изученным особенностям наноструктур на основе графена, которые определяли направление исследований в данной работе;

использовано сравнение полученных в диссертации данных с уже известными из литературы экспериментальными данными, а также результатами теоретических исследований таких или подобных систем;

установлено качественное совпадение авторских результатов с результатами, представленными в литературе, например, критических значений деформации для высокосимметричных направлений упругой деформации графена, фононного спектра графена и графана в отсутствие деформации; величины коэффициентов теплопередачи для двухслойных гетероструктур сравнимы с теми же величинами подобных гетероструктур;

использованы современные методики сбора и статистической обработки исходной и полученной информации, а также эффективные методы визуализации.

Личный вклад соискателя заключается в выборе направления исследования, постановке задач и разработке плана работ, подготовке программ для проведения расчетов, обработке и анализе полученных результатов и последующем оформлении их в виде научных публикаций. Все этапы численных экспериментов выполнены лично соискателем, либо при его активном участии.

На заседании 3 ноября 2016 г. диссертационный совет принял решение присудить Баимовой Ю.А. ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве «15» человек, из них «6» докторов наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния», «9» докторов наук по специальности 05.16.01 – «Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов», участвовавших в заседании, из «20» человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждении ученой степени – «14», против присуждения ученой степени – «0», недействительных бюллетеней – «1».

Председатель диссертационного совета,

д. ф.-м. н.

Ученый секретарь диссертационного совета,

д. ф.-м. н.

Мулюков Радик Рафикович

Имаев Марсель Фаниревич

7 ноября 2016 г.