

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации «Структура и физические свойства наноматериалов на основе графена», представленной Баимовой Ю.А. на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Графен или плоский лист из атомов углерода, расположенных в гексагональной решетке, является наиболее известным двумерным материалом, физические свойства которого еще не полностью исследованы. Однако отсутствие запрещенной зоны чрезвычайно затрудняет его применение в электронных устройствах. Искусственное создание в нем запрещенной зоны ухудшает другие свойства графена, в частности, его транспортные свойства. Следовательно, представляет интерес изготовление атомарно тонких листов из других материалов (например, MoS_2), с конечной шириной запрещенной зоны. Стремление улучшить прочностные свойства изделий стимулирует использование углеродных наноматериалов, созданных на основе графена, нанотрубок, фуллеренов и т.п.

Исследование физических свойств таких объектов представляется практически важным и **актуальным**. Экспериментальное изучение свойств этих материалов представляет значительные трудности из-за малости пространственных размеров или толщины объектов. Однако детальное исследование структуры, калорических и транспортных свойств углеродных нанообъектов может быть выполнено на основе молекулярно-динамического моделирования. Именно этот метод использован в диссертационной работе Баимовой Ю.А. Диссертантом выполнен большой объем актуальных исследований с применением в ряде случаев оригинальных методов расчета. Автором получен ряд **новых** результатов. Например, установлена область механической устойчивости графена, его послекритическое поведение, исследованы дискретные бризеры и их кластеры в графене и графене, предложен механизм разводораживания посредством возбуждения дискретных бризеров. Использование для расчетов программного комплекса для параллельных вычислений LAMMPS, тщательный анализ результатов расчета, сопоставление результатов с данными эксперимента и собственными расчетами аналогичных характеристик, а также высокая эрудиция автора позволяют сделать заключение о **надежности** и **достоверности** полученных Баимовой Ю.А. результатов.

В целом четкое изложение материала диссертации в автореферате все же не свободно от недостатков. К тексту автореферата имеются следующие 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 6×6 . 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 4×4 . 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 ν графена становится отрицательным. Так как материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона способны

Входящий ИИСМ
№ 471
от 02.10.2016

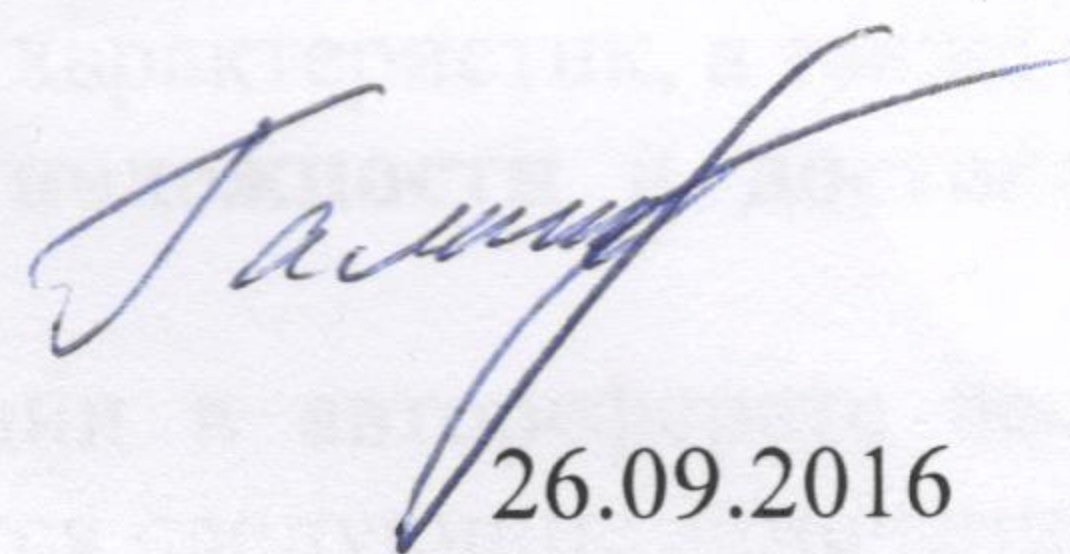
расширяться/сужаться в направлении, перпендикулярном направлению растяжения/сжатия, то при $\nu < 0$, создаваемым гидростатическим растяжением, графен становится более волнистым или шероховатым. Но данные о рифлении или шероховатости в автореферате не представлены. Хотя логично было бы сопоставить, насколько хорошо полученные для области устойчивости графена значения относительных деформаций ϵ_{xx} , ϵ_{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.

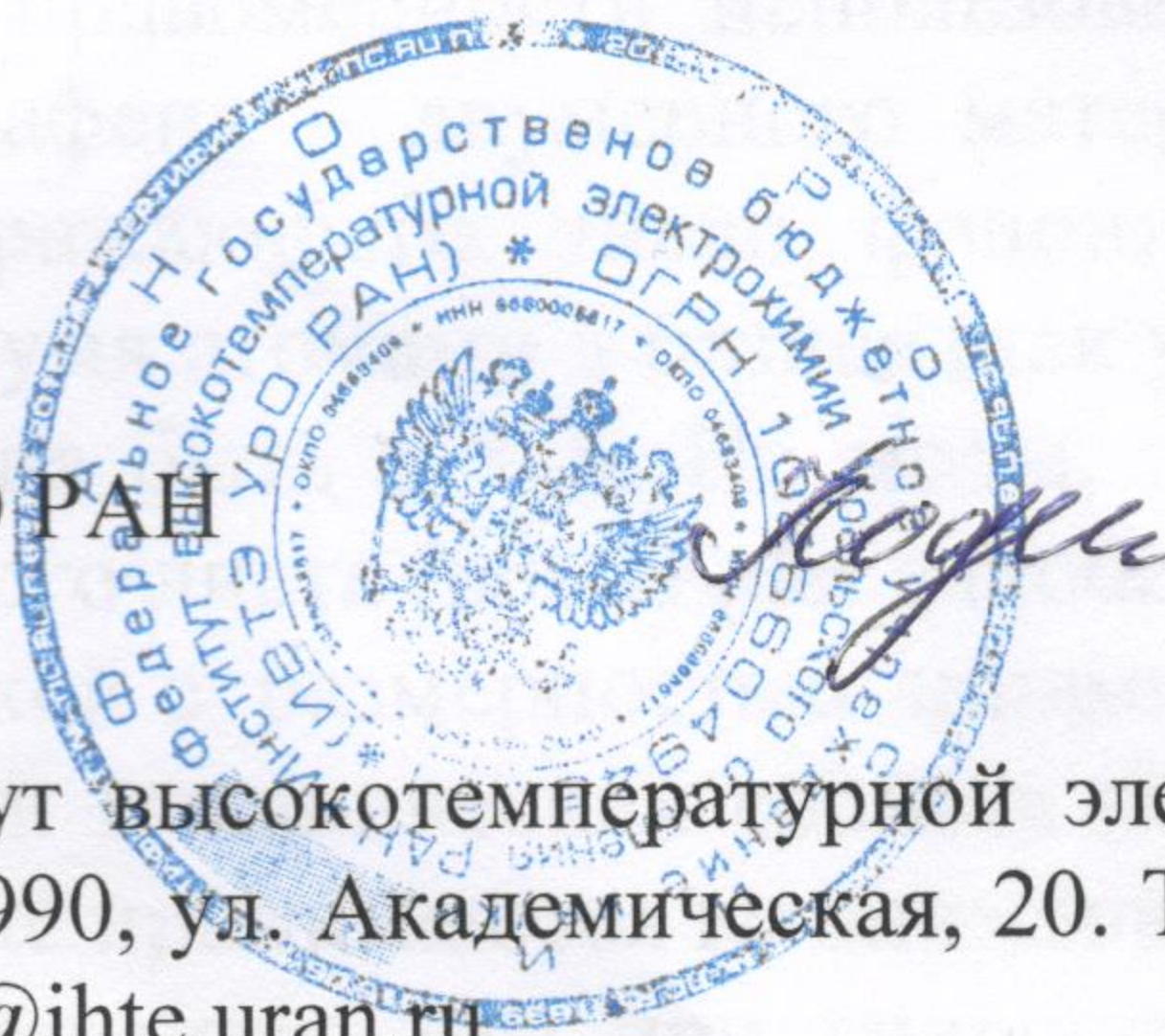
Указанные замечания не снижают ценности работы и не влияют на оценку работы в целом.

Материалы диссертации достаточно полно опубликованы в российских и зарубежных журналах, представлены на конференциях и семинарах. Диссертационная работа является законченным научно-квалификационным трудом, хорошо структурирована и написана хорошим научным языком. Диссертация соответствует всем требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор, Баимова Юлия Айдаровна, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук,
Главный научный сотрудник
Галашев Александр Евгеньевич
E-mail: alexander-galashev@yandex.ru


26.09.2016

Подпись Галашева А.Е. удостоверяю
Ученый секретарь ФГБУН ИВТЭ УрО РАН
к.х.н. Кодинцева А.О.



Адрес организации: ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург, 620990, ул. Академическая, 20. Тел.: +7 (343) 374-50-89, Факс: +7 (343) 374-59-92, E-mail: info@ihete.uran.ru