

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Баимовой Юлии Айдаровны** «Структура и физические свойства наноматериалов на основе графена», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Диссертация Баимовой Ю.А. посвящена исследованию структуры и свойств наноматериалов на основе графена, а также разработке рекомендаций, позволяющих реализовать практическое использование исследованных структур. Исследования проводились методом молекулярной динамики.

Среди наиболее важных результатов, полученных автором, хотелось бы отметить следующие:

1) разработаны методики расчета теплопроводности и теплопередачи в структурах на основе графена: графена, графана, систем силицен/графен и графен/дисульфид молибдена. На основании разработанной методики установлено, что перечисленные структуры показывают разное значение коэффициента теплопередачи при смене знака градиента температуры, т.е. обладают свойством теплового диода;

2) показано, что дискретные бризеры в графене могут выступать активаторами разводораживания, а обмен энергией между бризерами повышает вероятность отрыва атомов водорода от листа графена. Полученные результаты могут быть использованы для создания технологии хранения водорода на графене.

3) установлены механические свойства фуллеренов и алмазоподобных фаз. Среди системы фуллеренов и углеродных алмазоподобных фаз обнаружено несколько материалов-ауксетиков с отрицательным коэффициентом Пуассона. Эти данные могут создавать структуры на основе графена с заданными свойствами либо с возможностью управления ими.

В процессе прочтения автореферата у меня возникли следующие замечания и вопросы к автору:

1) На стр. 10 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 1.45 Å". Насколько мне известно, общепринятым расстоянием для связи С-С в недеформированном графене является 1.42 Å. Остается непонятным, 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 непонятно. Например, значению относительного удлинения по оси x ($\epsilon_{ps\ xx}$) «0.3» в области 2 соответствуют значения относительного удлинения вдоль оси y ($\epsilon_{ps\ yy}$) в диапазоне [-0.1; 0.3]. Получается, что для диапазона значений $\epsilon_{ps\ yy}$ [0; 0.3] коэффициент Пуассона не является отрицательным.

Блодацкий ИИИСМ
№ 825
от 20.10.2016

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 обычно графена.

5) Не учтено влияние топологии внешней оболочки C540 на энергетические ямы ониона 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 энергиями: 30 потенциальных ям с энергией E1, 12 – с энергией E2 и 20 – с энергией E3, причем $E1 > E2 > E3$. 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 графен 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.

Вместе с тем, высказанные замечания не снижают общего, весьма положительного впечатления о работе Баимовой Ю.А., которая выполнена на очень высоком уровне. Особо хотелось бы отметить публикационную активность автора: результаты диссертации изложены как в ведущих российских, так и зарубежных журналах с высокими импакт-факторами. Считаю, что тематика работы соответствует специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, соответствует требованиям п. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, а ее автор, Баимова Ю.А., заслуживает присуждения искомой ученой степени доктора физико-математических наук.

Доктор физико-математических наук, профессор по специальности Твердотельная электроника, радиоэлектронные компоненты, микро- и наноэлектроника, приборы на квантовых эффектах,
зав.кафедрой радиотехники и электродинамики ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»

Глухова Ольга Евгеньевна

Адрес: 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83

Телефон: 8(8452)514562

E-mail: glukhova@info.sgu.ru

