

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Баимовой Ю. А. «Структура и физические свойства наноматериалов на основе графена», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Актуальность работы. Исследования в области физики конденсированного состояния традиционно являются основой для создания новых функциональных материалов и устройств с улучшенными или необычными физическими свойствами. Перспективными материалами, в этом отношении, являются графен и его модификации, подтверждением чему является присуждение открывшим его ученым в 2010 году Нобелевской премии. С момента экспериментального получения графена с ним связаны надежды на создание качественно новых наноустройств. Эта задача требует детального теоретического изучения структуры и свойств материалов, на основе которых предполагается их создание. К таким материалам можно отнести, кроме самого графена, еще и гетероструктуры кремний/графен, новые виды трехмерных углеродных структур, исследуемые в данной диссертационной работе. Очевиден и круг требующих изучения проблем, например, получение графена, энергетический спектр которого имеет щель, исследование «наводороживания» и «разводороживания» графена, поиск новых углеродных наноструктур, исследование их свойств и т.д. К настоящему времени экспериментально многие свойства графена остаются не изученными. А современные методы теоретического исследования позволяют понять многие его особенности и свойства. Например, метод молекулярной динамики является

возможным инструментом для изучения структуры и свойств графена. Сказанное выше, говорит о том, что тема диссертационной работы Ю.А. Баимовой представляет интерес, как с научной (более глубокое представление о физике наноструктур), так и с прикладной точки зрения (разработка методов управления свойствами наноструктур), является современной и актуальной.

Структура и содержание работы. Диссертация состоит из введения, шести глав, заключения, списка опубликованных автором работ по теме диссертации и списка цитированной литературы. Каждая глава диссертации описывает ряд интересных исследований, объединенных общей тематикой. Диссертация снабжена большим количеством графиков, рисунков и таблиц.

В первой главе изложено описание метода исследования с полным обзором существующих потенциалов, сравнением полученных с использованием разных потенциалов межатомного взаимодействия результатов. Показана возможность применения метода молекулярной динамики для решения поставленных задач. Кроме этого, в первой главе описаны метод построения начальных структур и методика расчета теплопроводности и теплопередачи в одно- и двухслойных наноструктурах, разработанные диссертантом.

Вторая глава посвящена исследованию двумерных структур – графена, графана, графона, зигзаг-графона, гетероструктур. Определены различные параметры этих структур, позволяющие достаточно полно охарактеризовать их, найдены первичные характеристики материалов, показан способ создания гетероструктур с наилучшей когерентностью с помощью приложения упругой деформации.

Третья глава посвящена исследованию структур трехмерных материалов на основе графена. Представлены результаты исследования выбранных

начальных структур, описание их устойчивости/неустойчивости, некоторых их свойств и структурных характеристик.

В четвертой главе представлены результаты изучения механических свойств графена, его области устойчивости, послекритического поведения. Показано существование дискретных бризеров и их кластеров в графене и графене. Представлены результаты по исследованию влияния «наводороживания» на свойства графена и гетероструктур на его основе. Большую часть полученных результатов, представляет собой расчет коэффициента теплопроводности и теплопередачи в графене, «наводороженном» графене и гетероструктурах на основе графена. Упругая деформация и химическое модифицирование использованы как способы управления свойствами.

В пятой главе приведены результаты исследования механических характеристик углеродных алмазоподобных фаз, динамика слоев в многослойных структурах, управление свойствами трехмерных графенов посредством сжимающей деформации.

В шестой главе приведены рекомендации по управлению структурой и свойствами графена посредством упругой деформации. Выведены определяющие соотношения, позволяющие управлять свойствами трехмерных структур деформацией сжатием.

Научная новизна. Можно выделить следующие наиболее важные результаты, полученные диссертантом:

1. Впервые показано, что графен является ауксетиком, т.е. имеет отрицательный коэффициент Пуассона в определенном интервале деформаций;
2. Впервые обнаружены кластеры дискретных бризеров в графене и показано, что дискретные бризеры в составе кластера могут

- обмениваться энергией, т.е. участвовать в транспортировке энергии по кристаллу;
3. Впервые обнаружены щелевые дискретные бризеры в графене, рассчитаны их энергетические характеристики и показана возможность существования кластеров дискретных бризеров;
 4. Проанализировано влияние упругой деформации на плотность фононных состояний, скорость звука, корrugирование графена и на возможность получения когерентных гетероструктур;
 5. Впервые исследовано влияние сжимающей деформации различных видов (одно-, двух- и трехосной), на механические свойства трехмерных структур графена – «скомканного» графена, систем нанотрубок и фуллеренов;
 6. Впервые даны определяющие соотношения, которые позволяют задавать структурное состояние и свойства трехмерных структур на основе графена при различной степени деформации и температуре.

Научная и практическая ценность работы. Научная значимость работы, в первую очередь, определяется тем, что были исследованы новые углеродные наноматериалы, которые ранее либо совсем не исследовались, либо изучены лишь отчасти. Научную ценность также представляет изучение нелинейных явлений в углеродных структурах, поскольку в настоящее время данная область является малоизученной. В качестве практической значимости следует выделить разработку технологии использования упругих деформаций как средства управления физическими свойствами графена. Показано, что упругая деформация позволяет перевести графен из материала с положительным коэффициентом Пуассона в материал с отрицательным коэффициентом, что, безусловно, может иметь важное практическое значение. Большое значение для развития водородной энергетики, возможно, имеет исследование

«наводороженного» графена, как материала для транспортировки и хранения водорода.

Достоверность полученных результатов. Достоверность результатов диссертации вытекает из использования хорошо известных методов моделирования, широко используемых для изучения углеродных наноматериалов различного типа. Все использованные при расчетах потенциалы межатомного взаимодействия, хорошо известны из литературы, не однократно проверены сравнением полученных результатов с известными экспериментальными данными. Там, где это возможно, диссертант провел сравнение полученных результатов с известными из литературы теоретическими или экспериментальными данными. Следует отметить, что различные задачи были решены с использованием различных потенциалов межатомного взаимодействия, наиболее подходящих для решения конкретной задачи. Полученные диссертантом результаты признаны научным сообществом и цитируются, как российскими, так и зарубежными учеными.

Сделанные в диссертационной работе выводы и заключения достаточно обоснованы и полностью отвечают задачам исследования и полученным результатам.

Однако при ознакомлении с диссертацией, возникли **некоторые вопросы и замечания**, на которые хотелось бы получить пояснения:

1. Название диссертационной работы является излишне общим, т.к. в работе исследованы не все «структуры и физические свойства наноматериалов на основе графена», а скорее некоторые или ряд свойств и структур. Хотя это, конечно, не так просто, но в названии работы можно было попытаться более детализировать название решаемых задач.

2. Наличие большого числа статей, написанных диссертантом, за последние шесть лет предполагает (и это видно из списка авторских работ) большое количество соавторов. Во введении диссертации в пункте «вклад

автора» есть информация только об одном соавторе. В связи с этим, хотелось бы иметь более подробные сведения о разделении вклада диссертанта и ее соавторов в полученные результаты. Например, по таким фамилиям как Корзникова Е.А. (соавтор в девяти работах) и К. Zhou (соавтор в девятнадцати работах).

3. Во введении, а также далее по тексту показано, что дискретные бризеры могут влиять на некоторые физические свойства или процессы. Если для графана показано участие дискретных бризеров в «разводороживании», то для графена никакого четкого примера в тексте диссертации я не нашел.

4. Интересной особенностью исследованных в диссертационной работе «наводороженных» структур является то, что графон, в отличие от графена и графана, является ферромагнетиком. Было бы интересно, если бы диссертант, хотя бы кратко, описал известные к настоящему моменту отличия в свойствах этих материалов.

5. В заключении параграфа 5.1 проводится по таблице 5.4 сравнение полученных в работе с помощью метода молекулярной динамики величины коэффициента Пуассона с результатами, полученными другими авторами, квантово-механическими методами. Признается диссертантом, что «видны количественные изменения ...». Однако делается вывод, что «Тем не менее, результаты находятся в согласии ...». Хотелось бы знать мнение диссертанта – каким методом полученные результаты (а в некоторых случаях таблицы 5.4 они различаются в два раза) она считает ближе к истине?

6. Наконец, мелкие замечания по тексту и оформлению диссертации. Некоторые графики со сложной структурой или имеющие много цифровых обозначений по осям, имеют неоправданно маленький масштаб, что затрудняет их изучение (например, рис 1.7, 2.1, 2.3, 2.4, 2.5, 2.6, 2.14, 3.18, 4.8, 6.7). В списке литературы название одного из журналов встречается в двух видах - *physica status solidi (b)* и *phys. stat. solidi (b)*.

Сделанные замечания не снижают общего хорошего впечатления от диссертации, не затрагивают сущности проделанной работы и не влияют на общую положительную оценку работы в целом.

Рекомендации по использованию работы. Результаты диссертационной работы представляют интерес для исследователей, специализирующихся в области изучения новых наноматериалов и их свойств. В работе есть рекомендации по выбору материалов и способу его обработки для получения нужных свойств. Можно рекомендовать результаты диссертационной работы для использования в организациях, занимающихся исследованиями двумерных и трехмерных углеродных наноструктур, гетероструктур. В частности, в их числе могут быть следующие научные организации: ИОФ РАН, ФИ РАН, ИК РАН, ИРЭ РАН, ИФМК УНЦ РАН; образовательные: МГУ, СПбГУ, МФТИ, УрФУ, ЧелГУ, БашГУ и другие.

Представленные материалы отражены в большом числе высокорейтинговых публикаций, прошли апробацию на многочисленных всероссийских и международных конференциях, симпозиумах и семинарах, хорошо известны специалистам. Автореферат соответствует содержанию диссертации.

Исходя из вышесказанного, считаю, что диссертационная работа Баимовой Юлии Айдаровны «Структура и физические свойства наноматериалов на основе графена» является законченной научно-квалификационной работой, в которой автор на высоком научном уровне провел комплекс исследований актуальной проблемы – изучения структуры и физических свойств наноматериалов на основе графена. В работе изложены новые научные результаты и представлены рекомендации по их практическому применению.

Диссертационная работа отвечает требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертации на соискание ученой степени доктора наук согласно п.9

«Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ (№ 842 от 24 сентября 2013 г.).

Считаю, что Баимова Юлия Айдаровна заслуживает присуждения ей степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент

Евгений Григорьевич Екомасов

доктор физико-математических наук,

специальность 01.04.07 –

Физика конденсированного состояния,

профессор кафедры теоретической физики

Федерального государственного

бюджетного образовательного учреждения

высшего образования

«Башкирский государственный университет»

e-mail: ekomasoveg@gmail.com

Адрес: ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет», 450076, Уфа, Заки Валиди, 32. Тел.: +7 (347) 272-63-70, e-mail: rector@bsunet.ru.



Подпись: Екомасова Е.Г.
Заверяю: ученый секретарь БашГУ
Юлия Баимова С.Р.
« 12 » октября 2016