

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Баимовой Юлии Айдаровны «**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.

Диссертационная работа Баимовой Ю.А. посвящена исследованию методами компьютерного моделирования структуры и свойств ряда известных материалов на основе графена, а также поиску новых перспективных углеродных структур для разработки наноматериалов и наноустройств нового поколения.

Актуальность проблемы

Объектом исследования данной работы являются различные двумерные и трехмерные наноматериалы на основе графена, а также наводороженный графен, а результатом исследования явилось: (i) предсказание возможности существования и устойчивости ряда наноматериалов, (ii) определение их структурных и физических свойств, (iii) поиск путей управления свойствами двумерных и трехмерных углеродных структур посредством деформации или химического модифицирования. Актуальность данного исследования не вызывает сомнений, поскольку в настоящее время графен и подобные ему двумерные материалы, а также структуры на их основе активно изучаются во всем мире, поскольку они являются очень перспективными для применения в энергетике, электронике, оптике и т.д. Однако перспективы применения подобных материалов ограничены недостатком исследований, отсутствием полного понимания их структурных характеристик и свойств, сложностью

экспериментального исследования низкоразмерных структур. Поэтому изучение методами атомистического моделирования новых углеродных материалов, описание их интересных уникальных свойств, а также пополнение базы знаний по уже существующим структурам является важной в настоящий момент задачей.

Диссертация состоит из шести глав.

В **первой главе** описаны применяемые в работе модели и дано их обоснование. Описаны все использованные потенциалы межатомного взаимодействия, приведено сравнение результатов, полученных различными потенциалами. Далее представлена разработанная методика расчета коэффициентов теплопередачи и теплопроводности, которая может применяться для исследования графена, наводороженного графена и гетероструктур на его основе.

Во **второй главе** подробно описаны структуры исследованных двумерных материалов на основе графена, представлены основные сведения об их получении и свойствах. Также описан ряд структурных особенностей и свойств изучаемых в работе наноматериалов.

Третья глава посвящена описанию структуры и свойств трехмерных материалов на основе графена, представлены возможности их экспериментального получения и перспективы применения.

В **четвертой главе** представлены исследованные в данной работе механические и физические свойства графена, показана его область устойчивости в трехмерном пространстве компонент плоской деформации, показано влияние температуры и дефекта Стоуна-Уоллеса на прочность графена. Кроме того представлены результаты исследования локализованных колебательных мод (дискретных бризеров) и их кластеров в графене, показан обмен энергией между ними. Далее исследованы свойства наводороженного графена различных

модификаций, а также влияние степени наводороживания на теплопроводность графена. Продемонстрирован вклад дискретных бризеров в наводороженном графене в процесс его разводороживания при повышенных температурах. Теплофизические характеристики гетероструктур на основе графена исследованы на примере гетероструктуры графен/силицен и графен/дисульфид молибдена. Показано влияние водорода на теплопроводность таких гетероструктур.

Структурные, физические и механические свойства трехмерных структур на основе графена описаны в **пятой главе**. Исследована устойчивость углеродных алмазоподобных фаз и получены их константы упругости. Изучена динамика слоев в онионах и показаны их устойчивые конфигурации. Далее представлены результаты по исследованию механических свойств скомканного графена, структуры на основе фуллеренов и коротких углеродных нанотрубок под действием одно-, двух- и трехосной нагрузки.

В **шестой главе** представлены рекомендации по применению полученных результатов на практике. Например, даны рекомендации по управлению свойствами и структурой графена посредством упругой деформации в пределах области устойчивости графена и вне ее. Выведены определяющие соотношения для управления свойствами трехмерных материалов на основе фуллеренов, нанотрубок и чешуек графена.

Диссертация написана понятным научным языком, хорошо структурирована и аккуратно оформлена. Вся заимствованная из других источников информация снабжена соответствующими ссылками.

Новизна проведенных исследований и полученных результатов

Новизна исследования во многом связана с тем, что исследованные в работе материалы в настоящее время являются малоизученными, тем более, что их

экспериментальное получение и исследование часто затруднены. В работе методом молекулярной динамики были получены следующие новые результаты:

- детально исследованы механические свойства графена, установлены границы его структурной устойчивости;
- даны рекомендации по управлению такими параметрами графена как скорости звука, плотности фононных состояний и параметров морщин посредством упругой плоской деформации;
- исследованы нелинейные колебательные моды в графене и графене;
- показано, что свойствами гетероструктур на основе графена можно управлять посредством деформации или наводораживания;
- исследованы новые виды трехмерных графенов – скомканный графен, система фуллеренов и нанотрубок, онионы;
- показано, что в определенном интервале деформаций графен имеет отрицательный коэффициент Пуассона;
- впервые рассчитаны константы упругости углеродных алмазоподобных фаз и показано, что некоторые из таких материалов являются частичными ауксетиками, т.е. имеют отрицательный коэффициент Пуассона;
- найдены определяющие соотношения, описывающие связь между напряжениями и деформациями трехмерных графеновых структур, для трех видов нагружения: одно-, двух- и трехосного.

Степень достоверности полученных результатов

Достоверность результатов диссертации обеспечена использованием современных и апробированных методов исследования. В частности:

- в работе применялись три различных потенциала межатомного взаимодействия для описания взаимодействия между атомами углерода в

графене, а также два потенциала для описания межатомных взаимодействий для других типов атомов;

- все параметры моделей (граничные и начальные условия, скорость деформирования и т.п.) тщательно проверялись и подстраивались под решаемые задачи;

- для решения определенных задач (например, при учете тепловых колебаний, когда процесс трансформации структуры является статистическим) была набрана достаточно полная статистика и осреднение результатов проводилось по большому набору данных;

- проводилось сравнение результатов, полученных разными способами, а также сравнение с известными из литературы данными.

Достоверность результатов также подтверждается высоким уровнем апробации работы. Основное содержание диссертации опубликовано в 50 статьях в высокорейтинговых российских и зарубежных журналах, включенных в перечень ВАК. Результаты работы докладывались на российских и международных конференциях, а также на семинарах в сторонних научных учреждениях.

Значимость результатов, полученных в диссертации для науки и практики

Полученные в диссертации результаты имеют большое **научное значение**, поскольку вносят вклад в понимание физических и механических свойств новых углеродных материалов, в настоящий момент мало исследованных, но представляющих значительный интерес во многих областях науки и техники.

Важное **практическое** значение имеет изучение новых наноструктур на основе графена, поскольку такие исследования открывают перспективы дальнейшего экспериментального создания новых наноматериалов, обладающих уникальными свойствами. Немаловажным объектом исследования в данном ключе являются наводороженные графены, поскольку их изучение дает

надежду на то, что важная задача создания новых аккумуляторов водородного топлива будет решена именно за счет таких углеродных структур. Особого упоминания заслуживает применяемый автором способ управления свойствами углеродных структур посредством деформации. Важными практическими результатами данной работы являются: полученные зависимости различных свойств графена от упругой деформации, зависимость характеристик смятого графена от приложенной деформации, определяющие соотношения, задающие зависимость свойств трехмерных графенов от приложенной деформации.

Замечания и пожелания к работе:


1. Автор в диссертации развивает теорию участия нелинейных колебательных мод, дискретных бризеров, в разводораживании графена. Возникает вопрос, в какой степени такой механизм разводораживания, исследованный в модели с упрощенным межатомным потенциалом, может оказаться реализуемым на практике.
2. Автор в своей работе неоднократно упоминает различные способы управления свойствами углеродных материалов, например графена. Кроме того, показано влияние дефекта 5-7-5-7 на прочность графена. При этом автором никак не развивается мысль об управлении свойствами графена посредством введения дефектов. Более того, исследование всего лишь одного типа дефекта является некоторым упущением. Было бы более рационально показать влияние на прочность и, возможно, некоторые другие свойства графена, различных видов дефектов. Такое дополнение отлично вписалось бы в общую концепцию управления свойствами наноструктур, предлагаемую автором в работе.

3. В диссертации описана методика построения исходных структур, однако, сделано это очень кратко, не приведены детали, представлено лишь сжатое и очень общее описание.
4. Углеродные алмазоподобные фазы, исследованные в работе, представляются достаточно интересными объектами исследования. Не понятно, почему метод изменения их свойств посредством деформирования не применялся, подобно тому, как это было сделано для других рассмотренных структур. Это также очень красиво и продуктивно вписалось бы в концепцию работы.
5. Следует сделать несколько замечаний по оформлению диссертации, в целом достаточно аккуратному: рисунок 1.7, 2.9 – аббревиатура К скорее всего соответствует названию кремний, а в тексте далее одиночный слой кремния описывается как силицен; рисунок 2.3 – обозначение панелей рисунка и осей на английском; рисунок 3.9 – ячейки моделирования углеродных алмазоподобных фаз изображены одного размера, хотя из рисунка и текста очевидно следует, что ячейки по размеру должны отличаться.

Общая характеристика диссертационной работы

Сделанные замечания не затрагивают сущности проделанной работы и не влияют на положительную оценку работы в целом. Диссертация Баимовой Ю.А. представляется цельным, законченным, логически выстроенным научным трудом. Полученные в диссертации результаты можно квалифицировать как новые интересные научные достижения в области изучения свойств углеродных структур. Автореферат диссертации адекватно отражает ее основное содержание, выводы и положения, выносимые на защиту. Диссертационная работа Баимовой Ю.А. соответствует всем требованиям, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени доктора наук (п. II.9

«Положения о порядке присуждения ученых степеней»), полностью соответствует паспорту специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния». Считаю, что автор работы, Баимова Ю.А., заслуживает присуждения искомой ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент  Илья Анатольевич Овидько
доктор физико-математических наук,
профессор кафедры «Механика и процессы управления»
Федерального государственного
автономного образовательного учреждения
высшего образования «Санкт-Петербургский
политехнический университет Петра Великого»
e-mail: ovidko@gmail.com



Адрес: ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», 195251, Санкт-Петербург, Политехническая, 29. Тел.: +7 (812) 552 60 80, e-mail: office@spbstu.ru.