

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 посвящена теоретическим исследованиям методом молекулярной динамики структуры и свойств низкоразмерных материалов на основе графена. Объектами исследования работы являются квазидвумерные и квазитрехмерные структуры графена и скомканного графена, графана, графона, гетероструктур на основе силицен-графена, дисульфида молибдена-графена, алмазоподобных кластеров, содержащих короткие углеродные нанотрубки и системы фуллеренов.

Актуальность проведенных исследований определяется перспективностью применения наноматериалов на основе графена для электроники, энергетики, оптики, спинтроники, благодаря его необычным физическим, химическим, механическим, оптическим и электронным свойствам. Поэтому разработка и исследование новых углеродных наноматериалов, обладающих уникальными свойствами, является важной и актуальной задачей. Несмотря на большое количество работ на эту тему, остается много нерешенных вопросов, касающихся свойств графена и других углеродных структур, их получения и применения на практике.

Экспериментальное исследование таких структур в большинстве случаев

является сложной и ресурсоёмкой задачей, в то время как многие свойства наноматериалов могут быть исследованы теоретически, методами моделирования. Графен, представляющий двумерную структуру, является прекрасным модельным материалом, многие свойства которого могут быть очень подробно исследованы, в частности, методом молекулярной динамики. Для этой цели могут быть использованы хорошо апробированные потенциалы межатомного взаимодействия, которые позволяют реалистично моделировать различные свойства графена и наноматериалов на его основе. Результаты моделирования могут быть использованы не только для изучения свойств уже реализованных систем, но и для предсказания новых углеродных наноструктур различной размерности. Поэтому применение использованного в работе метода молекулярной динамики является вполне обоснованным для решения выбранных автором проблем.

Проведенное в диссертационной работе исследование касается различных проблем и областей исследования углеродных материалов, и позволяет пролить свет на различные нерешенные до сих пор проблемы – управление механическими и физическими свойствами графена и трехмерных структур на его основе посредством деформации, наводороживание и разводороживание графена, использование гетероструктур на основе графена для построения электронных устройств. Диссертационная работа демонстрирует большое многообразие структур, реалистично предсказывает их физические свойства, и указывает область их возможного практического применения.

Новизна проведенных исследований и результатов

В работе впервые подробно исследованы нелинейные явления в графене и наводороженном графене (графане), такие как локализованные

колебательные моды или щелевые дискретные бризеры. Впервые исследованы кластеры, образованные дискретными бризерами в графене и графене. Показано, что в таких кластерах может происходить заметный обмен энергией между его составляющими, т.е. дискретные бризеры могут участвовать в переносе энергии в кристалле.

Существенная часть диссертационной работы посвящена исследованию качественно новых структур, а также прогнозированию их устойчивости, структурных характеристик и физических свойств. Так, например, показано, что большинство углеродных алмазоподобных фаз, ранее исследованных теоретически и считавшихся устойчивыми, таковыми не являются, либо оказываются неустойчивыми под воздействием слабых внешних возмущений. Новым и перспективным также представляется предложенный автором механизм разводораживания графена посредством возбуждения в нем дискретных бризеров. Кроме того, много внимания в диссертационной работе уделено изучению трехмерных графенов, например, скомканного графена, который мало изучен в настоящее время. Таким образом, новизна полученных результатов связана в первую очередь с изучением механических и физических свойств скомканного графена, а также с разработкой методики управления механическими свойствами трехмерных графенов различного состава посредством деформации.

Степень достоверности полученных результатов

Метод молекулярной динамики, использованный в работе, является известным и хорошо апробированным методом исследования физических, кинетических и механических свойств материалов, что подтверждает достоверность проведенных исследований. В работе применяются хорошо

апробированные на различных углеродных и углерод-водородных структурах потенциалы межатомного взаимодействия. Кроме того, проведено сравнение результатов, полученных разными потенциалами, и проанализирована область применимости того или иного потенциала в зависимости от решаемой задачи. Все параметры представленных моделей тщательно проверены, найдены оптимальные условия моделирования. Полученные результаты сравниваются, где это возможно на сегодняшний день, с известными экспериментальными данными.

Значимость результатов, полученных в диссертации для науки и практики

Научная значимость результатов заключается в получении многочисленных новых данных по исследованию большого многообразия углеродных структур, как двумерных, так и трехмерных, и в накоплении данных по их физическим и механическим свойствам.

Практическая значимость результатов состоит в разработке теоретической базы для управления свойствами графена, двумерных и трехмерных материалов на его основе посредством приложения упругой или неупругой деформации. Для графена показано, как происходит изменение его физических свойств и реализуются структурные конформации под воздействием всех возможных компонентов плоской деформации, а также показана область, где графен может быть деформирован упруго. Кроме того, исследованы различные факторы, влияющие на прочность графена, такие как температура и дефекты Стоуна-Троуэра-Уэлса, и показано, что оба эти фактора ослабляют прочность графена.

Важное практическое значение имеет также разработка методики расчета теплопроводности, которая может применяться для расчета коэффициентов теплопроводности и теплопередачи в однослойных и двуслойных структурах

на основе графена и второго материала с гексагональной решеткой. Применение этой методики позволило исследовать различные гетероструктуры и показать перспективу применения гетероструктуры силицен-графен в роли теплового выпрямителя.

Поскольку в настоящее время активно развивается направление использования графена в водородной энергетике, важной практической задачей является изучение различных видов наводороженного графена (графана), их свойств, влияния химического модифицирования (в данном случае наводороживания) на свойства графена. В работе исследованы структуры графена с различными видом и степенью наводороживания, рассчитаны их коэффициенты наводороживания. Кроме того, исследованы щелевые дискретные бризеры и показано, что дискретные бризеры могут участвовать в разводороживании графена, а также в транспортировке энергии в кристалле.

Диссертация состоит из 6 глав, написана хорошим научным языком и легко читается. Каждая глава предваряется кратким обзором существующих результатов и постановкой нерешенных к данному моменту задач, которые легли в основу данного исследования.

Список весьма актуальной литературы по теме диссертационной работы полно охватывает затронутые области исследования.

Во **введении** автор работы освещает такие аспекты диссертации как её актуальность, цель, конкретные задачи исследования, выделяет её научную новизну и практическую ценность.

В **первой главе** диссертации приведена информация о методах молекулярно-динамического (МД) моделирования, обоснован выбор

потенциалов межатомного взаимодействия, применяемых в методе МД для изучения углеродных структур, а также описаны модели, используемые в данной работе. Обозначены основные проблемы моделирования методом МД и представлено сравнение данного метода с другими. Описана разработанная автором модель расчета теплопроводности различных квазидвумерных структур на основе графена.

Во **второй главе** диссертации приведены основные сведения о квазидвумерных наноматериалах на основе графена (наводороженный графен, квазидвумерные гетероструктуры кремний-графен и графен-дисульфид молибдена). Даны представления об их свойствах, структуре, методах получения и исследования.

В **третьей главе** диссертации описаны свойства и структурные особенности трехмерных материалов на основе графена. Показаны выбранные в данной работе трехмерные структуры (алмазоподобные и слоистые структуры, фуллериты и клубки углеродных нанотрубок, скомканный графен), рассмотрены перспективы их синтеза и применения.

В **четвертой главе** диссертации излагаются результаты исследования графена и квазидвумерных материалов на его основе. Рассмотрены несколько видов наводороженного графена и исследована теплопроводность этих систем. Рассчитана теплопроводность квазидвумерных структур графен-кремний и графен-дисульфид молибдена. Показана возможность возбуждения дискретных бризеров и их кластеров в графене и графене. Исследовано разводораживание графена посредством возбуждения дискретных бризеров. Показана возможность управления свойствами квазидвумерных структур посредством упругой деформации.

В **пятой главе** диссертации рассмотрены свойства трехмерных наноструктур на основе графена, таких как алмазоподобные фазы, фуллериты, системы углеродных нанотрубок и скомканный графен.

Показана возможность управления свойствами таких структур посредством пластической деформации.

В **шестой главе** диссертации описаны основные перспективы использования квазидвумерных и трехмерных материалов на основе графена. Описаны возможности управления свойствами графена и его структурными конформациями посредством деформации. Даны рекомендации по получению заданных значений скоростей звука и параметров складок в графене при заданных деформациях. Представлены определяющие соотношения, которые позволяют однозначно задавать свойства трехмерных структур при различных схемах нагружения и температурах.

Оценивая диссертационную работу в целом, следует отметить, что она является весьма объемным исследованием, содержащим важные новые результаты, и выполненном в современном научном стиле с использованием достижений современной компьютерной физики. Очень ценным в представленной диссертационной работе является её четко выраженная тенденция не ограничиваться чисто теоретическими аспектами полученных результатов, а формулировать на их основе конкретные прикладные перспективы их практического использования.

По работе можно сделать следующие **замечания и пожелания**.

1. Не описан и не определен упомянутый уже на стр. 10 дефект 5-7-5-7.

2. Не дано определение коэффициента теплопередачи G в уравнении (1.20), и не объяснено его отличие от коэффициента теплопроводности λ , определенного уравнениями (1.18) и (1.19).
3. Утверждение на страницах 31 и 55, что «изгибная жесткость недеформированного графена равна нулю» требует разъяснения, поскольку именно эта жесткость приводит к конечной групповой скорости ZA мод, показанных на рисунке 1.5.
4. В связи с приведенной на рис. 1.6 схемой расчета теплопроводности с нагревом в центре полосы графена, желательно было бы также обсудить возможность нагрева только одного края полосы. Это позволяет, моделируя то же число атомов, измерять теплопроводность полосы с эффективно удвоенной длиной.
5. В работе нет ссылок на недавние исследования, опубликованные в Nature Communications 7, 11281 (2016), показавшие увеличение поверхностной теплопроводности графена, связанного с подложкой из оксида графена через молекулярный контакт.

Заключение

Отмеченные недостатки не влияют на положительную оценку диссертационной работы в целом. Диссертация Баимовой Ю.А. выполнена на высоком научном уровне и представляет собой законченную научную работу. Результаты диссертационной работы достаточно полно отражены в 50 публикациях в российских и международных изданиях высокого уровня. Совокупность полученных результатов представляют большой научный и практический интерес. Таким образом, диссертационная работа соответствует требованиям пункта 9 Положения «О порядке присуждения

ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук, а ее автор, Баимова Юлия Айдаровна, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:

Доктор физико-математических наук,

Ведущий научный сотрудник

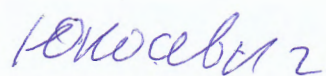
Отдела полимеров и композиционных материалов

Федерального государственного бюджетного учреждения науки

Института химической физики им. Н.Н. Семенова

Российской академии наук

Косевич Юрий Арнольдович



Косевич Ю. А.

19 октября 2016 г.

Адрес: ИХФ РАН, 119991 Москва, ул. Косыгина 4. Тел.: (495) 939-7139, факс: (495) 137-8284, e-mail: yukosevich@gmail.com.

Подпись Косевича Юрия Арнольдовича удостоверяю.

Ученый секретарь ИХФ РАН, к.х.н.



Стрекова Л.Н.