

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.080.03

на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 27 мая 2021 г., протокол № 6/21

О присуждении Галиахметовой Лейсан Халиловне, гражданке РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Устойчивость и механические свойства трехмерных углеродных наноматериалов с sp^2 и sp^3 гибридизацией» по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния» принята к защите 17 марта 2021 г. (протокол заседания № 2/21) диссертационным советом Д 002.080.03 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук (ИПСМ РАН), адрес: 450001, г. Уфа, ул. Степана Халтурина, 39, приказ Министерства образования и науки РФ о создании совета - № 785/нк от 10.07.2015 г.

Соискатель Галиахметова Лейсан Халиловна, 1992 года рождения, в 2016 году окончила Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Башкирский государственный университет» (БашГУ), в 2020 году – аспирантуру ИПСМ РАН. Соискатель работает стажером-исследователем в лаборатории 09 «Нелинейная физика и механика материалов» ИПСМ РАН.

Диссертация выполнена в лаборатории 09 «Нелинейная физика и механика материалов» ИПСМ РАН.

Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор РАН **Баимова Юлия Айдаровна**, ведущий научный сотрудник ИПСМ РАН.

Официальные оппоненты: **Косевич Юрий Арнольдович** - доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова РАН и **Маслов Михаил**

Михайлович - кандидат физико-математических наук, доцент Института нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университета «МИФИ», дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация - Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет» (ЧелГУ) в своем положительном заключении, составленном профессором кафедры физики конденсированного состояния, доктором физико-математических наук **Беленковым Евгением Анатольевичем**, указала, что диссертационная работа Галиахметовой Л.Х. выполнена на актуальную тему и представляет собой логически выстроенную и завершенную научно-исследовательскую работу, в которой содержится решение научных задач, имеющих существенное значение для развития физики конденсированного состояния, в области, связанной с исследованием структуры и свойств новых наноструктурированных углеродных материалов. В отзыве содержатся замечания, которые не снижают ценности работы и не влияют на положительную оценку работы в целом.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что они являются компетентными в данной отрасли науки, широко известны своими достижениями в данной области и способны определить научную и практическую ценность диссертации. В ЧелГУ имеются ученые, являющиеся безусловными специалистами в области физики конденсированного состояния и, в частности, работающих по тематике «углеродные наноматериалы», к которой относится диссертация (д.ф.-м.н. Беленков Е.А., к.ф.-м.н. Грешняков В.А. и др.).

Соискатель имеет по теме диссертации 13 статей, опубликованных в рецензируемых зарубежных и отечественных журналах, рекомендованных ВАК, в том числе 11 - в журналах, индексируемых в международных базах данных (БД Scopus и Web of Science), а также другие публикации - тезисы докладов и статьи в сборниках трудов конференций. Наиболее значимыми работами являются статьи,

опубликованные в журналах *Diamond and Related Materials* (2018, V. 81, P. 154-160), *Computational Materials Science* (2020, V. 172, Art. 109355; 2021, V. 192, Art. 110301), относящихся к квартилю Q2 в БД Web of Science, и журнале квартиля Q3 в той же БД *Physica Status Solidi (b)* (2016, V. 253, P. 1295; 2018, V. 256, Art. 1800049). В диссертации отсутствуют недостоверные данные об опубликованных соискателем научных работах.

На диссертацию и автореферат поступило 7 положительных отзывов:

1. Ведущего научного сотрудника Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова (АлтГТУ), д.ф.-м.н., профессора **Полетаева Геннадия Михайловича** (замечаний нет).

2. Заведующего кафедрой физики АлтГТУ, д.ф.-м.н., профессора, заслуженного деятеля науки РФ **Старостенкова Михаила Дмитриевича** (замечаний нет).

3. Заведующего лабораторией механики технологических процессов Института проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, д.ф.-м.н. **Лисовенко Дмитрия Сергеевича** и научного сотрудника лаборатории механики технологических процессов того же института, к.ф.-м.н. **Волкова Михаила Андреевича**. В отзыве два замечания: 1) В пятом пункте раздела «Научная новизна» на странице 4-5 указаны следующие результаты: «Рассчитаны экстремальные значения модуля сдвига и модуль Юнга исследованных углеродных наноматериалов» На стр. 5 в «Методах исследования» написано, что «По известным правилам пересчета упругих констант в новой системе координат, определялись оси одноосного растяжения и направления поперечной деформации, для которых коэффициент Пуассона принимает максимальные и минимальные значения, а также рассчитывался средний коэффициент Пуассона для поликристалла». Возможно, в пятом пункте раздела «Научная новизна» нужно было указать, что также экстремальные значения коэффициента Пуассона углеродных наноматериалов; 2) На стр. 9 в последнем абзаце, описывающем результаты второй главы, s_{ij} названы коэффициентами податливости. На стр. 9 во второй строке снизу s_{ij} названы как модули податливости, на стр. 12 как константы податливости s_{ij} . Автору следовало бы использовать одно обозначение для одних и тех же величин.

4. Заведующего кафедрой общей и экспериментальной физики Алтайского государственного университета, д.ф.-м.н., профессора **Плотникова Владимира Александровича**. Есть два замечания: 1) Автор свои результаты по структуре моделируемых материалов сравнивает с результатами работ Беленкова Е.А. [15,16]. Однако это также моделируемые углеродные структуры, полученные компьютерным моделированием. Таким образом автор сопоставляет свой компьютерный эксперимент и компьютерный эксперимент коллег. Очевидно, корректно сопоставлять модельные структуры с углеродными структурами, полученными в эксперименте. Автору можно порекомендовать познакомиться с нашими экспериментальными работами по структурному состоянию углеродных алмазоподобных пленок (Письма в ЖТФ. 2019. Т. 45. №7. С. 52-57. DOI 10.21883/PJTF.2019.07.47540.17477; Diamond and Related Materials. V.114, (2021), 108334. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2021.108334>). 2) Автор в главе 4, акцентируя внимание на проблеме устойчивости углеродных алмазоподобных фаз, отмечает увеличение одних углов между связями от 90° до 103° и уменьшением других – до 76° , однако не приводит величин длин связей в различных конфигурациях. Известно, что в экспериментах с алмазоподобными структурами, полученными по CVD-технологии, межплоскостные расстояния составляют $d_{111}=0,208$ нм, а $d_{220}=0,117$ нм, что отличается от межплоскостных расстояний в кристаллах природного алмаза ($d_{111}=0,258$ нм и $d_{220}=0,125$ нм).

5. Профессора кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, д.ф.-м.н., доцента **Захарова Павла Васильевича**. В отзыве имеются три замечания: 1) Во вводной части автореферата говорится о применении двух видов потенциалов - AIREBO и Леонардо-Джонса, однако при описании главы 2 кратко рассмотрен первый потенциал, а второй не упоминается вовсе. Также не сказано про границы применимости данных потенциалов в рамках решаемых задач. 2) При исследовании деформации углеродных алмазоподобных фаз в автореферате приводятся данные для двух значений температуры: $T=1$ К и $T=300$ К. Из текста не ясно, почему выбраны эти значения температуры, проводилось ли исследование для других значений, если да, то в каких пределах и почему?

3) Присутствуют незначительные технические огрехи. Например, в заключении во втором выводе в одном из слов пропущена буква «т». На мой взгляд, не вполне удачно сформулирована фраза про количество опубликованных работ.

6. Профессора кафедры радиофизики и нелинейной динамики Института физики Саратовского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского, д.ф.-м.н, профессора **Четверикова Александра Петровича**. Имеются 3 замечания: 1) Для алмазоподобных фаз углерода в работе определены критерии устойчивости. Возможно ли применить подобные критерии для других структур, например, для таких же фаз на основе кремния? 2) Автор нигде не обсуждает фактические применения данных кристаллов. Несмотря на то, что теоретическое исследование механических свойств материала является важной задачей, хотелось бы понимать их будущие приложения. 3) В автореферате автор иногда допускает использование разных терминов для обозначения одних и тех же коэффициентов и характеристик, например, «модуль упругости» и «константа упругости», хотя следовало бы придерживаться однообразия и выбрать один термин.

7. Научного сотрудника Института высокотемпературной электрохимии УрО РАН, к.ф.-м.н. Рахмановой Оксаны Рашитовны. Имеются 3 замечания: 1) Проводила ли автор моделирование изучаемых объектов с использованием другого известного потенциала для моделирования двумерных углеродных структур – потенциала Терсоффа, и если да, то какие принципиальные отличия наблюдались в полученных результатах, по сравнению с используемым потенциалом AEREBO? 2) Известны ли автору какие-либо эксперименты по получению фуллеранов и тубуланов или схожих структур? 3) По какому принципу были сформированы начальные конфигурации фуллеранов, тубуланов и УАФ на основе графена? Была ли применена какая-то система их создания или формы выбирались случайным образом?

В отзывах указано, что представленная работа имеет большое практическое значение и по своей новизне и актуальности соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

предложены критерии устойчивости углеродных алмазоподобных фаз, которые позволяют однозначно определить устойчивые фазы;

проведен полный анализ упругих характеристик фуллеритов и углеродных алмазоподобных фаз, а именно: рассчитаны коэффициент Пуассона, модуль Юнга, модуль сдвига и объемный модуль, причем установлена их ориентационная зависимость;

обнаружены новые фуллериты-ауксетики, а также ауксетики среди углеродных алмазоподобных фаз;

описано деформационное поведение углеродных алмазоподобных фаз при гидростатическом растяжении и сжатии, и определены механизмы деформации как в области упругих, так и неупругих деформаций.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказаны положения, вносящие вклад в расширение представлений об углеродных алмазоподобных фазах и их механических свойствах;

выведены критерии устойчивости, позволяющие однозначно определить круг алмазоподобных фаз, которые могут быть в дальнейшем синтезированы экспериментально;

изложены основные закономерности деформационного поведения углеродных алмазоподобных фаз, найдены критические напряжения, рассмотрены механизмы деформирования при гидростатическом растяжении и сжатии.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

проанализирована связь структурных параметров фуллеритов и углеродных алмазоподобных фаз и механических свойств данных материалов, что позволяет управлять их свойствами посредством изменения морфологии;

предсказаны фуллериты, имеющие отрицательный коэффициент Пуассона;

систематизировано понимание природы и механизмов упругого и неупругого деформирования углеродных алмазоподобных фаз;

определен спектр углеродных алмазоподобных фаз, которые обладают уникальными свойствами, например, имеют отрицательный коэффициент Пуассона

или повышенную прочность, что позволяет использовать их в качестве прочных покрытий;

выявлены структуры с сильной ориентационной зависимостью модуля Юнга и коэффициента Пуассона, что может в дальнейшем служить рекомендацией к поиску углеродных алмазоподобных фаз с заданными свойствами.

Результаты диссертации могут быть использованы в развитии теории углеродных наноматериалов, в разработке методов экспериментального получения углеродных алмазоподобных фаз с улучшенными свойствами, в том числе с большим модулем упругости и отрицательным коэффициентом Пуассона, которые могут найти разнообразное применение в качестве конструкционных материалов, материалов для электроники и водородной энергетики, а также в вузовских учебных курсах по углеродным наноматериалам.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

в исследованиях использованы как стандартные, так и специально написанные вычислительные программы, а также классические методы молекулярной динамики с применением хорошо апробированных многочастичных межатомных потенциалов взаимодействия;

полученные численные результаты не противоречат базовым физическим закономерностям;

установлены совпадения и объяснимые отличия результатов автора диссертации с результатами, представленными в литературе.

Личный вклад соискателя заключается в выборе методов решения задач, разработке плана работ, подготовке и проведении численных расчетов, обработке и анализе полученных результатов, последующем их оформлении в виде научных публикаций. Постановка задач и анализ полученных результатов проводились при активном участии соискателя.

Диссертационный совет пришёл к выводу о том, что диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой, в соответствии с критериями, установленными п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от

24.09.2013 № 842, получены новые, научно обоснованные результаты изучения новых структур углеродных наноматериалов, имеющие значение для развития физики конденсированного состояния.

На заседании 27 мая 2021 г. диссертационный совет принял решение присудить Галиахметовой Л.Х. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 11 докторов наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния», 6 докторов наук по специальности 05.16.01 – «Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов», участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени – 18, против присуждения ученой степени – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель диссертационного совета,
чл.-корр. РАН, проф., д.ф.-м.н.



Муллюков Радик Рафикович

Ученый секретарь диссертационного совета,
к.т.н.

Саркеева Айгуль Анваровна

27 мая 2021 г.

Заключение подготовил:

Председатель комиссии
диссертационного совета, д.ф.-м.н.

Назаров Айрат Ахметович