

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Галиахметовой Лейсан Халиловны «Устойчивость и механические свойства трехмерных углеродных наноматериалов с sp^2 и sp^3 гибридизацией», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Актуальность темы диссертации

Открытие в последние десятилетия новых кристаллических форм углерода, и их исключительно высокая практическая значимость для различных областей электронной техники и промышленности существенно стимулировали создание углеродных наноматериалов различного назначения, интенсивный рост исследований их структуры и физических характеристик. Поэтому тема данного исследования актуальна и представляет большой интерес, особенно с точки зрения изучения свойств новых углеродных наноструктур, таких как углеродные алмазоподобные фазы (УАФ). Выяснение их физических и механических свойств поможет обнаружить углеродные наноматериалы с улучшенными характеристиками, которые необходимо экспериментально исследовать в первую очередь.

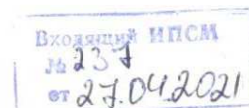
Структура диссертации

Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения и списка цитируемой литературы. Общий объем составляет 163 страницы машинописного текста.

В **первой** главе диссертант приводит достаточно подробный обзор литературы, посвященной теме исследования, а именно: описаны углеродные наноструктуры и их основные свойства, освещены способы синтеза новых материалов. В обзоре литературы включены как теоретические, так и экспериментальные исследования, которые охватывают уже исследованные характеристики и свойства УАФ. Кроме того, определены не решенные к данному моменту задачи.

Во **второй** главе приведено описание компьютерных моделей, используемых в работе. Представлен обзор методов компьютерного моделирования, потенциалов межатомного взаимодействия, и проведено сравнение применяемого метода с другими.

Третья глава содержит результаты численного моделирования фуллеритов на основе молекул фуллерена разного размера, а также результаты расчета технических констант упругости рассмотренных кристаллов фуллерита. При анализе упругих констант были выявлены фуллериты с частичной ауксетичностью (фуллериты C_{60} с ГЦК укладкой и C_{48} с ПК укладкой). Далее описано деформационное поведение фуллеритов на основе фуллеренов разного размера в



процессе гидростатического сжатия. Показано, что фуллерит имеет высокую жесткость на сжатие и остается упруго-деформируемой средой до высоких плотностей около $2,5 \text{ г/см}^3$.

Четвертая глава посвящена исследованию устойчивости УАФ и определению основных критериев устойчивости для УАФ разной морфологии. Диссертант выделяет три критерия устойчивости: релаксационную (способность УАФ существовать в процессе поиска минимума потенциальной энергии при применении реалистичного межатомного потенциала), деформационная (способность УАФ выдерживать упругие деформации), и соблюдение термодинамических критериев (также называемых критериями Борна). Структура считается устойчивой только при соблюдении всех трех критериев.

Для устойчивых УАФ разной анизотропии проведен расчет модулей упругости. Особый интерес представляет анализ технических коэффициентов упругости, которые проводились совместно с коллегами диссертанта из ИПМех РАН. В данной работе впервые был проведен полный анализ коэффициента Пуассона, модуля Юнга, модуля сдвига и объемного модуля. Показано, что для большинства фаз модули упругости являются ориентационно-зависимыми (анизотропными) и в зависимости от направления растяжения могут измениться в два-три раза. Обнаружены УАФ с модулем Юнга, превышающим модуль Юнга алмаза и графита.

Среди изученных четырнадцати устойчивых УАФ были выявлены шесть фаз-ауксетиков, имеющих отрицательный коэффициент Пуассона. Сравнение полученных значений коэффициента Пуассона с известными из теоретических и экспериментальных работ значениями констант упругости показало хорошее согласие.

В **пятой** главе описано деформационное поведение устойчивых УАФ на основе фуллереноподобных молекул, углеродных нанотрубок и графена при гидростатическом давлении (растяжении и сжатии). В главе подробно рассмотрен механизм деформирования на примере нескольких УАФ: построены кривые давление-деформация для двух температур (0 К и 300 К), а также проанализировано изменение длин связей и валентных углов в процессе деформации. Показано, что увеличение температуры до комнатной не приводит к значительному изменению деформационного поведения. Деформация УАФ протекает за счет изменения начальных неравновесных значений ковалентных связей и углов.

В **заключении** сформулированы основные выводы по работе.

Научная новизна и достоверность защищаемых положений

Достоверность полученных данных подтверждается применением апробированных численных методов, согласием с экспериментальными результатами других авторов и непротиворечивостью известным физическим моделям.

Впервые теоретически предложены критерии устойчивости углеродных алмазоподобных фаз на основе применения метода молекулярной динамики с реалистичными межатомными потенциалами.

Впервые теоретически сделан полный анализ модулей упругости УАФ (коэффициент Пуассона, модуль Юнга, модуль сдвига и объемный модуль) в зависимости от направления растяжения для фуллеритов и УАФ. Обнаружены структуры, являющиеся частичными ауксетиками (имеющие отрицательный коэффициент Пуассона).

Впервые теоретически описаны основные механизмы деформационного поведения устойчивых УАФ в процессе гидростатического растяжения и сжатия.

Практическая и теоретическая значимость работы

Полученные в диссертации результаты представляют интерес для специалистов, работающих в области исследования и разработки углеродных материалов, и могут быть использованы для подготовки рекомендаций по расширению области применения углеродных алмазоподобных фаз.

К **важнейшим результатам** диссертационной работы Галиахметовой Л.Х. можно отнести:

- сформулированы критерии устойчивости для углеродных алмазоподобных фаз;
- среди исследованных аналитическими методами структур выделены структуры-ауксетики;
- изучены структурные характеристики и деформационное поведение различных углеродных наноструктур.

Вопросы и замечания:

1. Следовало дать объяснение того, как деформируются материалы в неупругой области. Используемая процедура не ясна из текста. Применял ли автор деформацию и измерял результирующее напряжение (как обычно) или наоборот? Как контролировалось приложенное напряжение? Как контролировались стенки ячейки моделирования в процессе нагружения?
2. Важным вопросом с точки зрения практического использования УАФ является их термостабильность. Следовало бы проверить эти структуры на термостабильность и представить эти данные в диссертации.
3. Для УАФ на основе листов графена важным для возможных применений является также устойчивость структуры при одноосном, а не только всестороннем (гидростатическом) сжатии. Может ли изменение распределения приложенных напряжений повлиять на трансформацию кристаллической структуры алмазоподобной фазы?

Заключение по диссертации

Диссертационная работа Галиахметовой Л.Х. представляет собой законченное научное исследование, посвященное изучению устойчивости и механических свойств двух типов углеродных наноматериалов. Диссертант провел большую работу над выявлением устойчивых конфигураций, рассмотрел механизмы деформационного поведения в условиях гидростатического давления, а также совместно с коллегами из другого института проанализировал и выявил новые важные механические характеристики фуллеритов и УАФ. Сделанные в работе выводы полностью соответствуют поставленной цели и научным задачам. Представленные результаты диссертационной работы опубликованы в профильных научных изданиях, рекомендованных ВАК, и прошли апробацию на научных конференциях. Диссертационная работа является полноценным квалификационным исследованием и соответствует требованиям и паспорту специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, а Галиахметова Л.Х. заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Я, Косевич Юрий Арнольдович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой Диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Официальный оппонент:

Доктор физико-математических наук по специальности
01.04.02 – Теоретическая физика, главный научный сотрудник
Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова
Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН),
Адрес: 119991, Москва, ул. Косыгина, 4
Телефон: +7 (499) 137-29-51
Факс: +7 (495) 651-21-91
E-mail: yukosevich@gmail.com

севи Ю.А. Косевич

«21» апреля 2021 г.

Подпись _____ Ю.А. Косевича _____ заверяю

Ученый секретарь ФИЦ ХФ РАН
кандидат физико-математических наук



Л
Л
М.Н. Ларичев