

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ СВЕРХПЛАСТИЧНОСТИ МЕТАЛЛОВ
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (ИПСМ РАН)

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета Д 002.080.03
на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук
по присуждению ученой степени доктора физико-математических наук

от 3 ноября 2016 г. протокол № 15/16

Защита диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук
Баимовой Юлии Айдаровны

на тему: «СТРУКТУРА И ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
НАНОМАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА»

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

СТЕНОГРАММА

заседание диссертационного совета Д 002.080.03

на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук
по присуждению ученой степени кандидата физико-математических наук

от 3 ноября 2016 г., г. Уфа

Председательствующий – член-корреспондент РАН, доктор физико-математических наук Р.Р. Мулюков.

Ученый секретарь совета – доктор физико-математических наук М.Ф. Имаев.

Председатель открывает заседание и сообщает, что на заседании присутствуют 15 членов совета из 20, из них 6 докторов наук - специалисты по профилю рассматриваемой диссертации.

ПРИСУТСТВОВАЛИ:

1. Мулюков Р.Р. – чл.-корр., д.ф.-м.н., 01.04.07
2. Имаев М.Ф. – с.н.с., д.ф.-м.н., 01.04.07
3. Астанин В.В. – с.н.с., д.ф.-м.н., 05.16.01
4. Валитов В.А. – д.т.н., 05.16.01
5. Дмитриев С.В. – проф., д.ф.-м.н., 01.04.07
6. Зарипов Н.Г. – с.н.с., д.ф.-м.н., 05.16.01
7. Имаев В.М. – с.н.с., д.т.н., 05.16.01
8. Корзникова Г.Ф. – с.н.с., д.т.н., 01.04.07
9. Лутфуллин Р.Я. – с.н.с., д.т.н., 05.16.01
10. Имаев Р.М. – с.н.с., д.т.н., 05.16.01
11. Маркушев М.В. – д.т.н., 05.16.01
12. Мигранов Н.Г. – проф., д.ф.-м.н., 01.04.07
13. Назаров А.А. – с.н.с., д.ф.-м.н., 01.04.07
14. Утяшев Ф.З. – с.н.с., д.т.н., 05.16.01
15. Юмагузин Ю.М. – проф., д.ф.-м.н., 01.04.07

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ – чл.-корр., д.ф.- м.н., 01.04.07 Р.Р. Мулюков: Уважаемые

члены диссертационного совета, уважаемые коллеги, у нас имеется кворум, есть предложение начать. Нет возражений? Тогда объявляется защита диссертации Баимовой Юлии Айдаровны «Структура и физические свойства наноматериалов на основе графена».

Официальные оппоненты по диссертации:

1. Доктор физико-математических наук, проф., зав. лабораторией ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» Овидько Илья Анатольевич

2. Доктор физико-математических наук, в.н.с. ФГБУН Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Косевич Юрий Арнольдович

3. Доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики Башкирского государственного университета Екомасов Евгений Григорьевич

Ведущее предприятие – ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет».

Слово для оглашения материалов личного дела соискателя предоставляется ученому секретарю, д.ф.-м.н. Имаеву М.Ф.

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ – д.ф.-м.н. Имаев М.Ф. оглашает материалы личного дела соискателя, отмечая, что все документы оформлены в соответствии с требованиями Минобрнауки и ВАК.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Есть ли вопросы к ученому секретарю по личному делу? Нет. Слово для доклада по диссертационной работе предоставляется соискателю.

СОИСКАТЕЛЬ: Добрый день, уважаемые коллеги. Разрешите представить вашему вниманию мою диссертационную работу посвященную исследованию структурных особенностей и физических свойств графена и наноматериалов на его основе. Исследование наноматериалов, их свойств и структурных особенностей, например, такого материала как графен, и структур на его основе в настоящее время представляется интересной и актуальной задачей. Уникальные свойства графена, такие как высокая электро- и теплопроводность, прочность, уникальные оптические свойства, определяют широкие перспективы его применения. Интересно, что чешуйки графена могут быть преобразованы в другие

полиморфы углерода – фуллерены и нанотрубки, кроме того использованы для создания различных углеродных структур – это гетероструктуры на основе графена, наводороженный графен, которые могут применяться, например, в электронных устройствах, для транспортировки и хранения водорода; это новые трехмерные структуры и композитные материалы, которые можно использовать, опять же, для создания устройств нового поколения. Однако все перспективы в данный момент труднореализуемы, поскольку существует целый ряд не решенных задач и вопросов, не смотря на то, что исследования идут в последнее десятилетие очень активно. Например, одна из таких задач – это создание щели в энергетическом спектре графена, отсутствие которой является его важнейшим недостатком и мешает его применению в электронных устройствах. Также это поиск новых наноматериалов, например, гетероструктур на основе графена. Уже экспериментально показано существование таких гетероструктур как силицен-графен и графен-дисульфид молибдена, которые могут быть использованы для создания электронных устройств, солнечных батарей. Однако при рассмотрении таких структур встают вопросы по их теплопроводности – не возникают ли точки разогрева; как вообще происходит распределение тепла в подобных материалах. Не менее важным материалом является наводороженный графен – это структура графена на которую различным образом осажден водород. Здесь главными вопросами является то, каким способом следует производить наводороживание, как происходит разводороживание графена, и как сделать эти процессы управляемыми и контролируемые. К тому же интересно создавать структуры с различной морфологией. Например, наводороживание позволяет создавать гетероструктуры графен-наводороженный графен. Таким образом, тут перспектив очень много, но много и вопросов. Другая область применения графена – это создание трехмерных структур на его основе. Уже экспериментально были получены трехмерные структуры, представляющие собой клубки нанотрубок, фуллерит, слоистые структуры или онионы. Недавно был найден такой материал как скомканный графен, который представляет собой систему скомканных чешуек графена. Перспектива применения – это создание суперконденсаторов. Также существуют

различные гипотетические, еще не полученные экспериментально, материалы, обладающие интересными свойствами. Реализация всех этих перспектив, опять же, затруднена, поскольку недостаточно данных по этим структурам, их свойствам, даже просто по структурным параметрам. Для таких материалов метод молекулярной динамики и другие теоретические методы исследования обладают большим потенциалом и выходят на первый план. Почему это так? Потому что, все-таки, экспериментальные работы являются дорогостоящим: и само получение и дальнейшее исследование структуры. Изучение свойств требует мощного оборудования, к тому же объекты очень миниатюрные. Метод молекулярной динамики позволяет хорошо моделировать такие двумерные структуры. Для трехмерных структур этот метод позволяет исследовать большие структуры, большой объем атомов. Поэтому теоретические методы очень хорошо применимы к данным объектам.

В связи с этим была поставлена цель работы – исследование методом молекулярной динамики структуры и свойств наноматериалов на основе графена, разработка рекомендаций по их практическому применению, поскольку в данном случае моделирование позволяет в некоторых случаях дать экспериментаторам направления для исследования. Основными задачами исследования стало создание молекулярно-динамических моделей большого многообразия структур, двумерных и трехмерных. Это разработка методики расчета теплопроводности для графена и структур на его основе. Это исследование механических свойств графена, его послекритического поведения. Изучение механических свойств трехмерных структур на основе графена, фуллеренов и нанотрубок. И, конечно, подготовка рекомендаций для практического применения исследованных материалов, а также разработка рекомендаций по управлению свойствами изученных структур посредством упругой или не упругой деформации. В качестве метода исследования было выбрано молекулярно-динамическое моделирование. Основой любого такого расчета является правильный выбор потенциала межатомного взаимодействия, поскольку именно он лежит в основе всего расчета и описывает то, каким образом атомы взаимодействуют друг с другом. Существует несколько хорошо

апробированных потенциалов для углеродных структур – это потенциал Бреннера, потенциал Айребо (потенциал Айребо входит как стандартный в программу молекулярной динамики Ламмпс), набор межатомных потенциалов, разработанный моим соавтором Александром Васильевичем Савиным. Все эти потенциалы активно используются для исследования графена, углеродных нанотрубок, гидроуглеродных структур и обладают каждый своими преимуществами и недостатками. Помимо графена в работе рассматривается также силицен и дисульфид молибдена, для моделирования которых используется хорошо известный потенциал Стилинджера-Вебера. Достоверность полученных результатов проверяется сравнением результатов, полученных разными потенциалами, сравнением с моделированием из первых принципов, а также с уже известными из литературы экспериментальными данными.

Как уже было сказано, исследование теплопроводности является важной и интересной задачей при изучении структур на основе графена и самого графена. Графен является очень удачным объектом для изучения теплопроводности поскольку такая миниатюрная система может быть эффективно исследована методом молекулярной динамики и, к тому же, позволит получить представление о том, как происходит распределение теплоты в наноструктурах. Была разработана методика расчёта теплопроводности и теплопередачи для исследования структур на основе графена, которая представлена на данном слайде. Нагрев происходит по центру образца, а охлаждение - по краям образца, что аналогично подобному эксперименту по измерению теплопроводности графена. Распределение тепла происходит по закону Фурье. В модели каждую единицу времени Δt происходит нагрев на величину энергии $\Delta \xi$. И, соответственно, тепловой поток может быть рассчитан по представленной на слайде формуле. Из этих двух формул может быть выведена формула для расчёта коэффициента теплопроводности. Я говорю кратко, безусловно, в диссертации вся методика описана более подробно. Коэффициент теплопередачи рассчитывался для двухслойных структур и однослойной гетероструктуры. На слайде показана двухслойная гетероструктура, где передача тепла осуществляется от нижнего слоя к верхнему, в результате чего постепенно

устанавливается градиент температуры в системе. Это происходит по указанным на слайде законам, из которых может быть выведен коэффициент теплопередачи, который использовался для расчёта теплопередачи в гетероструктурах силицен-графен и графен-дисульфид молибдена, но также может быть использован и для других подобных материалов.

Итак, опишу структуру материалов исследованных в работе. Во-первых, это сам графен. Напомню, что есть два высоко симметричных направления - зигзаг и кресло. Далее - это три вида наводороженного графена. Атомы водорода показаны синим. Первый материал - это графан: атомы присоединяется сверху и снизу листа графена. Второй материал - это графон: атомы водорода присоединены сверху листа графена через один. Оба эти материала уже были найдены экспериментально, поэтому они и были выбраны для исследования. Третий материал получил условное название зигзаг-графон: атомы присоединены сверху и снизу листа графена вдоль линий зигзаг. Это просто одна из гипотетических структур, свойства которых необходимо изучить. Как я уже упомянула, большой проблемой является отсутствие щели в энергетическом и фононном спектре графена. На рисунке представлен фононный спектр графена в не деформированном состоянии, откуда видно отсутствие щели – красная кривая. Приложение упругой деформации позволяет получить в спектре достаточно широкую щель – черная кривая. Далее в докладе будут описаны рекомендации по управлению размерами щели в спектре. Кроме того деформация позволяет управлять скоростями звука графена. Здесь показано красным три скорости звука не деформированного графена и, соответственно, скорости звука при приложении деформации. Во-первых, меняется их ориентация, во-вторых - величина. Например, скорость ZA была нулевая, а при деформации она принимает достаточно большое значение. Синие точки соответствуют экспериментальным данным, то есть видно достаточно хорошее совпадение с экспериментом. Также химическое модифицирование, в данном случае наводороживание, приводит к появлению щели в фононном спектре. Вообще говоря, появление щели очень важно для создания электронных устройств. Но в данной работе изучение щели в фононном спектре рассматривается в

контексте изучения щелевых дискретных бризеров, которые могут быть найдены, только если в спектре имеется щель. Ещё два материала исследования - это силицен-графен и графен-дисульфид молибдена (двухслойные структуры) и однослойная структура силицен-графен.

Класс трехмерных материалов представлен кластерами и трёхмерными углеродными алмазоподобными фазами. Кластер представлен на примере фуллереноподобной молекулы C_{48} . Две молекулы объединены в кластер. На их основе могут быть созданы и трёхмерные структуры, причём связи в них будут очень жёсткими. Вторая структура - это онионы, то есть фуллерены заключённые друг в друга. Такие структуры вызывают большой интерес, поскольку часто наблюдаются экспериментально, но свойства их мало изучены. И следующие три структуры – это структуры на основе фуллеренов, углеродных нанотрубок и чешуек графена, где элементы структуры связаны силами Ван-дер-Ваальса.

Основной структурой в исследовании всё-таки являлся графен. Были изучены его механические свойства, его после критическое поведение, прочность. На рисунке представлена область устойчивости графена в пространстве плоской деформации ϵ_{xx} , ϵ_{yy} и ϵ_{xy} . Сдвиговая деформация показана градициями серого цвета. Видно, что графен выдерживает достаточно большие упругие деформации. Ещё одним интересным свойством графена является то, что при определённых значениях деформации он является ауксетиком. Была исследована область устойчивости при нулевой сдвиговой деформации - она показана на этом рисунке. Красная область соответствует появлению отрицательного коэффициента Пуассона, то есть графен при растяжении в одном направлении становится шире и в направлении перпендикулярном растяжению.

При изучении прочности нельзя не исследовать влияние дефектов на прочность графена, поскольку в эксперименте, вообще говоря, бездефектный графен сложно получить. Базовыми дефектами являются дефекты 5 и 7, которые является дисклинациями, если проводить аналогию с металлами. Очень часто они существуют в виде дислокаций - это дефект 5-7, ну, и также часто встречающийся дефект, который наблюдается экспериментально это так называемый дефект

Стоуна-Троуэра-Уэлса или 5-7-5-7. В работе рассмотрены две ориентации дефекта и обе снижают прочность графена при растяжении в направлении кресло и не оказывают влияния на прочность при растяжении вдоль направления зигзаг. Аналогичный результат получен при конечных температурах, а не только при нулевой. На графике чёрные кривые соответствуют растяжению вдоль направления кресло и видно, что различие для структуры с дефектом и без дефекта очень сильные. А для растяжения вдоль направления зигзаг кривые фактически совпадают. Результат представлен в величинах энергии активации разрыва.

Очень интересным представляется и послекритическое поведение графена. Деформация сильно влияет на его свойства. В области, показанной красным, графен остается плоским, как я уже говорила ранее. В тёмно-красной области происходит разрыв связей; серая область - это образование хаотических морщин и складок, то есть корругирование графена. Жёлтая область - это появление одномерных складок. Искривление и корабление графена в значительной мере влияет на его свойства, поэтому важной задачей является управляемое получение таких складок. Далее в докладе я буду говорить о практических рекомендациях для получения таких структур.

Очень мало исследованы нелинейные свойства графена, в том числе, дискретные бризеры или нелинейные локализованные колебательные моды. Что представляет собой дискретной призёр в графене? Это локализованное колебание двух атомов углерода в противофазе в направлении кресло. Этот бризер может локализовать достаточно большую энергию, порядка одного электрон-вольт и, соответственно, может участвовать в различных физических процессах в твёрдом теле, например, в образовании дефектов или даже трещин. Кроме того, были исследованы кластеры дискретных бризеров и, как видно на графике, три кривые для каждого из бризеров в кластере пересекаются, т.е. постоянно происходит обмен энергией, происходит ещё больше локализация энергии и бризеры могут участвовать в транспортировке энергии по кристаллу. Такие же объекты были найдены в графене. Здесь бризер представляет собой локализованное колебание атома водорода над или под плоскостью графена. В данном случае над плоскостью.

Также бризеры локализируют достаточно большую энергию. Была предложена гипотеза о том, что бризеры в графене могут принимать участие в процессе разводораживания. До сих пор процесс разводораживания остается достаточно непонятным. Из полученных результатов видно, что дискретный бризер помогает процессу разводораживания и облегчает этот процесс.

Итак, перейду к исследованию теплопроводности графена и наводороженного графена, а также гетероструктур. Во-первых, оказывается, что наводороживание приводит к короблению нанолент графена. Предложенная в работе методика работает только для плоских структур, поэтому была приложена растягивающая деформация. Самый главный вывод в том, что наводороживание сильно понижает теплопроводность графена, поскольку происходит смена sp^2 гибридизация на sp^3 .

Для гетероструктур были найдены очень интересные эффекты. Например, однослойная гетероструктура силицен-графен. На границе раздела происходит сильный скачок температуры, то есть граница является основным препятствием для переноса тепла. Для чего может быть использована такая структура - это создание тепловых выпрямителей, здесь поток тепла больше, если он направлен от графена к силицену, как видно из графика. Это достаточно интересное явление и довольно редкое.

Для двухслойной структуры также были получены интересные результаты по механизмам теплопроводности в этих структурах. В основном судить о механизмах теплопроводности можно по фононным спектрам. В гетероструктуре графен-силицен передача тепла идёт от графена к силицену. А в гетероструктуре графен-дисульфид молибдена слои, составляющие структуру, фактически не оказывают влияние друг на друга. Поскольку показано, что водород для графена сильно понижает теплопроводность интересно исследовать влияние водорода на теплопроводность гетероструктуры, например, графен-силицен. Водород был добавлен в трёх вариациях: первая - водород между слоями графена и силицена, вторая - водород сверху и снизу графена и третий вариант - водород под слоем графена. Наибольшая величина коэффициента теплопередачи была получена для

случая, когда водород расположен между слоями графена и силицена, причём до 50 % содержания водорода.

Трёхмерные структуры представляются также очень интересными объектам исследования. Ранее, в представленной на слайде ссылке, были исследованы углеродные алмазоподобные фазы, и теоретическими методами было показано, что существует достаточно много вариаций таких структур. Здесь представлен кластер из двух молекул, а здесь уже объёмные структуры, состоящие из большого количества молекул, как показано в проекции на плоскость xz . Основываясь на уже известных результатах, методом молекулярной динамики было проведено исследование кластеров и показано, что отличие от тех данных, что уже представлены в литературе в том, что углы между фуллереноподобными молекулами остаются перпендикулярными. Это не совсем так: в динамике происходит изменение, иногда разрыв связей и структуры являются неустойчивыми. В особенности это справедливо для трёхмерных структур. Было показано, что все 10 материалов являются устойчивыми, но в статике. В динамике, например, структура A5 совсем не является устойчивой, структура A1 является мало устойчивой, также как и A2. Фактически наиболее устойчивыми являются структуры A3, A4 и A7 и для этих структур были исследованы константы упругости: коэффициент Пуассона, модуль юнга, модуль сдвига. Показано, что эти материалы являются ауксетиками, как и сам графен и, следовательно, углеродные структуры представляются очень перспективными в смысле поиска материалов с отрицательным коэффициентом Пуассона, что редко встречается в природе.

Онионы. Было рассмотрено достаточно много конфигураций, здесь представлены только некоторые из них. Часть из них не является устойчивыми - происходит образование кластеров, смятие оболочек. Другие, такие как C20@C80 являются устойчивыми структурами, и важной задачей здесь является рассмотрение динамики слоев, поскольку такие структуры могут быть использованы в качестве наногироскопов. Но поскольку, например, в структуре C20@C80 соотношение диаметров фуллеренов мало и слои расположены очень близко друг другу, движение не значительное. Был рассмотрен гигантский

фуллерен C_{540} , для которого были выбраны различные положения внутреннего фуллерена C_{20} в ячейке и при различных температурах исследовано движение внутреннего фуллерена в ячейке. Показано, что оно достаточно активное. А если, например, расположить внутренний фуллерен достаточно близко к границе, происходит образования ковалентной связи и последующий разрыв внешней оболочки.

Самой интересной структурой, исследованной в работе, является скомканный графен, который только недавно был получен экспериментально. Уже есть исследования его свойств, но очень мало и метод молекулярной динамики в данном случае является мощным инструментом исследования, поскольку может предсказать до сих пор не известные свойства. Скомканный графен представляет собой смятые скомканные чешуйки графена, соединённые между собой силами Ван-дер-Ваальса. В эксперименте это чешуйки различного размера, ориентации и по-разному смятые. Молекулярная динамика позволяет проследить зависимость свойств материала от размера чешуек, их дисперсности и распределения. Вот, например, на рисунке представлен моно- и полидисперсный скомканный графен. Приложение гидростатического сжатия показывает, что более прочным является монодисперсный графен. Были исследованы два вида сжатия одно- и трёхосное. Символ p - это для гидростатики, а σ - это для одноосного сжатия. Показано, что при одноосном сжатии можно достичь больших напряжений в системе. Разгрузка показала, что скомканный графен не является упруго деформируемым и при действии сжатия чешуйки графена начинают сминаться очень быстро, и вернуться в исходное состояние невозможно.

Интересно сравнить поведение скомканного графена, то есть материала, состоящего из чешуек графена, с материалом, состоящим из фуллеренов и коротких нанотрубок. Также было исследовано несколько видов нагружения: здесь показан пример для гидростатической деформации. Красная кривая для скомканного графена. Видно, что это самый легкодеформируемый материал, чешуйки легко сминаются. До плотности $2,5 \text{ г/см}^3$ наблюдается, что наиболее прочным является фуллерит (синяя кривая), поскольку из деформации

структурного элемента видно, что фуллерен до больших плотностей плохо сжимается и только при очень большом давлении происходит схлопывание и разрушение. Для нанотрубок наблюдается совсем иная картина (черная кривая). Нанотрубки легко деформируемы в направлении перпендикулярно оси, но сжать нанотрубку в направлении оси фактически невозможно, поскольку это короткие нанотрубки. До плотности $2,5 \text{ г/см}^3$ нанотрубки очень быстро схлопываются, затем смять их еще больше невозможно, и поэтому материал в целом становится прочнее. Разгрузка показала, что система нанотрубок также как и скомканный графен не является упругой средой, а фуллерит может быть деформирован упруго, то есть кривые разгрузки почти полностью совпадают с кривыми нагружения.

Важная часть работы - это вывод рекомендаций по практическому применению полученных результатов, и вообще, рассмотренных в работе материалов. Одна из основных идей - это управление свойствами материала посредством упругой деформации. Для графена этот метод работает очень хорошо. Здесь представлено как при гидростатическом растяжении графена изменяется величина скорости звука. Также видно, что меняется ориентация скоростей звука. Самое важное, что было показано - это в какой части области устойчивости могут быть найдены состояние, когда графен имеет щель в фононном спектре. Красным пунктиром очерчены участки области устойчивости, где может быть обнаружена щель. Если проследить по спектру видно, что в точке А, где щель не должна появиться её действительно нет, как и у не деформированного графена; в точке Б на границе появления щели она достаточно узкая, чуть ближе или дальше от границы она будет исчезать или уширяться соответственно; в точке В щель достаточно хорошо заметно и в точке Г она имеет наибольшую ширину. Интересно, что изменение размеров щели происходит по направлению деформации сжатия вдоль оси y и направления растяжения вдоль оси x . На самом деле в левом верхнем углу области устойчивости щель достаточно небольшая и, допустим, для поиска щелевых дискретных бризеров, этой ширины недостаточно.

Немаловажным является и изменение структуры графена при приложении деформации - получение корругированного графена. В эксперименте показано, что

и сам графен в свободном состоянии плоским не остается, стремиться к смятию. Также на подложках происходит корругирование графена. Самое интересное, что появление кривизны приводит к изменению его свойств том числе и проводящих, изменяется химическая активность графена, например, водород легче осаждать по вершинам складок. Поэтому в работе представлены достаточно чёткие рекомендации о том, как можно получить ориентированные конфигурации с заданными параметрами - это амплитуда, длина волны и ориентация. Интересно, что приложение сдвиговой деформации влияет на ориентацию складок. Здесь показаны два примера области устойчивости для нулевой сдвиговой деформации и сдвига 10%. Для нулевой сдвиговой деформации существует только две ориентации - ноль и 90° - в то время как даже небольшая сдвиговая деформация изменяет ориентацию морщин от нуля до 90° . На слайде показаны примеры складок в точках А, Б и В. Как видно изменяются и длина волны и амплитуда и ориентация.

Были даны также определяющие соотношения, которые позволяют однозначно задать состояние материала для трехмерных структур на основе фуллеренов, чешуек графена и коротких нанотрубок при заданной деформации и температуре. Определяющие соотношения имеют вид степенной зависимости. Параметры A и α определялись из графика, и именно они позволяют задать структурное состояние материала. Таблицы с параметрами представлены в диссертации.

Здесь представлено количество опубликованных работ: результаты диссертации были опубликованы в 50 статьях в журналах из списка ВАК или зарубежных журналах.

Выводы по работе. Рассмотрен широкий спектр квазидвумерных и трехмерных наноматериалов на основе графена, методом молекулярной динамики найдены их равновесные и устойчивые конфигурации, исследованы их структура и свойства под действием упругой и необратимой деформации, а также температуры. Показано существование большого многообразия наноматериалов на основе графена с сильно различающимися свойствами и предложены пути модификации

их структуры и свойств путем деформации и нагрева. Установлены границы устойчивого упругого деформирования плоского графена и основные варианты его послекритического поведения, как то: разрыв и перестройка валентных связей при больших растягивающих мембранных усилиях или коробление при наличии сжимающих усилий. Показано, что одиночный дефект 5-7-5-7 слабо понижает прочность графена на разрыв. Разработан метод расчета теплопроводности и теплопередачи, применимый к квазидвумерным гетероструктурам на основе графена. Рассчитана теплопроводность таких структур как наводороженный графен, силицен/графен и графен/дисульфид молибдена. Некоторые гетероструктуры обладают свойством теплового диода, показывая разное значение коэффициента теплопередачи при смене знака градиента температуры. Модификация структур посредством добавления водорода в квазидвумерный наноматериал существенно влияет на их теплофизические свойства: (i) теплопроводность наводороженного графена понижается по сравнению с теплопроводностью чистого графена; (ii) добавление водорода между слоями гетероструктуры силицен/графен приводит к увеличению теплопроводности по сравнению с гетероструктурной без водорода. Зависимость теплопроводности от количества водорода является немонотонной. Упругая деформация является эффективным инструментом для управления структурой и физическими свойствами квазидвумерных материалов. При приложении сравнительно малых упругих деформаций может быть достигнуто наилучшее совпадение решеток разнородных гексагональных структур для создания гетероструктур с улучшенными свойствами. Упругая деформация позволяет контролировать геометрию и ориентацию складок в графеновых нанолентах с закрепленными краями, что, согласно работам других авторов, позволяет изменять химическую активность, электро- и теплопроводность нанолент. Упругая деформация приводит к анизотропии упругих и других свойств графена, к изменению скоростей звука, а также к появлению щели в спектре фононных колебаний, открывая возможность существования щелевых дискретных бризеров и их кластеров. Дискретные бризеры, обнаруженные в наводороженном графене, могут выступать активаторами

разводообразования. Показано, что при повышенных температурах отрыв атома водорода происходит с большей вероятностью, если он является ядром дискретного бризера, который может локализовать энергию до 1 эВ на фоне тепловых колебаний. Рассмотренные в работе кластеры близко расположенных бризеров позволяют локализовать еще большую энергию. Кроме того, обмен энергией между бризерами в кластере также повышает вероятность отрыва атомов водорода от листа графена. Алмазоподобные фазы и слоистые структуры, а также кластеры на основе фуллереноподобных молекул демонстрируют не только хорошую структурную устойчивость, но и интересные механические свойства. Среди системы фуллеренов и углеродных алмазоподобных фаз обнаружено несколько материалов-ауксетиков с отрицательным коэффициентом Пуассона. Взаимное движение фуллеренов в слоистых структурах сильно зависит от размера структурных элементов, их взаимного расположения и воздействия температуры. Показано, что материалы с sp^3 гибридизацией обладают большей прочностью по сравнению с sp^2 -структурами, где структурные элементы взаимодействуют посредством слабых сил Ван-дер-Ваальса. Неупругая деформация и температура позволяют управлять свойствами систем коротких УНТ и фуллеренов, а также скомканного графена. Все эти материалы показывают сильное сопротивление сжатию при плотности близко и выше плотности графита. При этом, схема деформирования (гидростатическое, двухосное или одноосное сжатие) оказывает незначительное влияние на механические свойства скомканного графена, в то время как для системы фуллеренов и коротких УНТ изменение схемы деформирования приводит к заметному изменению их свойств. Показано, что фуллерены и углеродные нанотрубки являются труднодеформируемыми структурными единицами по сравнению с чешуйками графена. Рассмотренные наноматериалы демонстрируют значительные перспективы их применения на практике для создания наномеханических и наноэлектронных устройств. Особенности взаимодействия графена с водородом обуславливают возможности его использования при транспортировке и хранении водорода. Предложенные карты зависимости структурного состояния графена от деформации позволяют

управляемо получать структуры с заданными свойствами. На основе деформационного отклика трехмерных структур на основе графена на сжатие выведены определяющие соотношения, которые могут быть использованы для создания трехмерных наноматериалов на основе графена с заданными свойствами.

Спасибо за внимание.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Спасибо. Вопросы, пожалуйста.

д.т.н. УТЯШЕВ Ф.З.: Юлия Айдаровна, почему деформация называется упругой, ведь она не является упругой, потому что не сохраняется после разгрузки ни структура, ни свойства, в чем ее упругость?

СОИСКАТЕЛЬ: Для графена из области устойчивости видно, что упругая деформация это только та деформация, которая лежит в пределах области устойчивости, например, от 0 до ~0,4 в направлении ϵ_{xx} и до -10 % сжатия. Почему здесь именно упругая деформация – потому, что графен остается плоским и, если деформацию снять, графен вернется в свое исходное состояние и никаких изменений не останется.

д.т.н. УТЯШЕВ Ф.З.: Тогда как деформация изменяет свойства?

СОИСКАТЕЛЬ: Допустим, нам нужно получить заданное значение размера щели в спектре. Растянув графен упруго, т.е. не нарушая его структуру, мы получим те свойства, которые нужно. При этом осаждая его на какую-то подложку можно получить нужное состояние и уже использовать так, как нам это необходимо.

д.т.н. УТЯШЕВ Ф.З.: У вас деформация вносит всякие кручение и изгибы, т.е. есть кривизна кручения присутствует.

СОИСКАТЕЛЬ: Когда появляются вот эти структурные изменения, корругирование – это уже не упругая деформация, видимо, это было не достаточно четко. Вот область устойчивости, где деформации упругие (показано на слайде).

д.т.н. УТЯШЕВ Ф.З.: А вот этот объект – бризер. Это у вас объект такой случайный или нет? Где он появляется и где не появляется?

СОИСКАТЕЛЬ: Вообще говоря, поскольку в спектре графена или графана есть щель, дискретные бризеры должны обязательно существовать. Другой вопрос,

что показать их существование, например, экспериментально, достаточно сложно, пока это не реализовано, но к этому идут. Это сам по себе возникающий объект, который должен существовать, поскольку есть щель в фононном спектре и поскольку показано, что они есть, в особенности при температуре, при тепловых флуктуациях, когда все атомы флуктуируют, какой-то из атомов может получить достаточную энергию и реализоваться в виде дискретного бризера.

д.т.н. УТЯШЕВ Ф.З.: Если щель мала, то нет, если щель большая, то да?

СОИСКАТЕЛЬ: Дело в том, что когда щель маленькая, бризеру начинают мешать фононные колебания и он не может локализоваться.

д.т.н. УТЯШЕВ Ф.З.: То есть это вероятностное явление?

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Он скорее всего не должен быть, а может быть. Что-то же должно повлиять, чтобы он появился, толчок какой-то?

СОИСКАТЕЛЬ: Температурные флуктуации, например.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: А если флуктуаций нет?

СОИСКАТЕЛЬ: Да, скорее всего следует говорить о том, что в определенный момент в материале существует некоторое количество бризеров, они могут затухать и появятся новые с определенной вероятностью.

д.ф.-м.н. МИГРАНОВ Н.Г.: 21 плакат. Там вы говорите об объемных структурах, но я вижу проекции на плоскость. Как вы можете охарактеризовать объем, там есть все эти объемноцентрированные конфигурации?

СОИСКАТЕЛЬ: В объемном изображении эти структуры представлены в диссертации (передает копию диссертации для ознакомления с рисунком).

д.ф.-м.н. МИГРАНОВ Н.Г.: Второй вопрос – вы проверяли систему на устойчивость, делали я так понимаю, теоретический анализ для графена. Эта система у вас динамическая?

СОИСКАТЕЛЬ: Для графена, здесь, где показана область устойчивости, это статика. Здесь мы искали мнимые частоты и если находили их, то материал не устойчив, в противном случае - устойчив. В основном все в работе сделано молекулярной динамикой и морщины, например. Но база для нахождения области деформаций сделана статикой.

д.ф.-м.н. МИГРАНОВ Н.Г.: Иначе я спросил бы вас как вы считали это в динамике, но раз это статика, вопрос снимается.

д.т.н. ЛУТФУЛЛИН Р.Я.: При изучении процесса коробления графена вы изучаете влияние дефекта 5-7-5-7. Что это за дефект? Вы вводите понятие дефекта 5-7-5-7, а раньше называли его по-другому. Вы его сами так назвали, это ваш термин или общепринятый? Раньше я слышал ваш доклад, и он по-другому назывался, вы как-то произвольно меняете название.

СОИСКАТЕЛЬ: Сверху в заголовке я специально сделала два названия – дефект Стоуна-Троуэра-Уэлса, иногда название сокращают до Стоуна-Уэлса, для удобства многие говорят дефект 5-7-5-7, поскольку из названия дефект Стоуна-Уэлса не ясно, что это за дефект. В самом начале работы я выбрала название дефект Стоуна-Троуэра-Уэлса, однако к данному моменту поняла, что удобнее использовать название 5-7-5-7.

УЧЕНый СЕКРЕТАТЬ: Вопрос по этому же плакату. Вы исследовали влияние дискретного бризера на разводораживание. Вот этот дефект 5-7-5-7 это ведь аналог дислокации, они должны еще сильнее влиять на взаимодействие с водородом. Вы не смотрели как они влияют на разводораживание?

СОИСКАТЕЛЬ: На самом деле это аналог дислокационного диполя. Нет, не смотрели.

УЧЕНый СЕКРЕТАТЬ: То есть эффект должен быть сильнее?

СОИСКАТЕЛЬ: Я не уверена, не думаю, что это так. Здесь гибридизация от того, что ввели дефект не изменилась и водород должен присоединяться также легко. Но это не исследовалось.

УЧЕНый СЕКРЕТАТЬ: Как визуально представить отрицательный коэффициент Пуассона? Как это происходит физически?

СОИСКАТЕЛЬ: Вот эта структура, например, ауксетик (показано на слайде). Здесь проекция, но видно, что есть круглые и квадратные ячейки, фуллереноподобные молекулы. При растяжении такая структура должна начать разбухать во всех направлениях. Сейчас структура, скажем так, схлопнута, при растяжении она начнет раскрываться во всех направлениях. Вот этот фуллерен

можно немного растянуть.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Подобным образом увеличивается диаметр круга?

СОИСКАТЕЛЬ: Да. Связи в фуллерене чуть увеличиваются, но не много, я не говорю о больших деформациях, до 1% только. И каждая связь чуть подрастает. И при растяжении в одном направлении, когда, казалось бы, должны тянуться только эти связи, другие тоже тянутся, приводя к разбуханию структуры. Как сфера раскрывается и схлопывается.

д.ф.-м.н. ИМАЕВ М.Ф.: То есть она сферой остается, в эллипс не превращается?

СОИСКАТЕЛЬ: Для ауксетика получается именно так.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: До не больших деформаций? А потом - в эллипс?

СОИСКАТЕЛЬ: Далее скорее всего произойдет разрыв, потому что ковалентные связи очень жесткие.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Какие наноматериалы на основе графена вы еще не рассмотрели? Вот разные гетероструктуры, а что еще можно рассмотреть?

СОИСКАТЕЛЬ: Сейчас интересным представляется рассмотреть графен с металлами, графен на подложках, например, никеля для разных электронных устройств.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: А чистые углеродные материалы?

СОИСКАТЕЛЬ: Есть, например, алмазные нанопленки – это тоже нанобъект, тоже углеродная структура, которая представляет большой интерес, поскольку предполагается, что может быть использована для создания защитных покрытий, причем совершенно невидимых.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: По скомканному графену вы можете сказать какое будет соотношение энергетическое или силовое ковалентных и Ван-дер-Ваальсовых связей? Или это зависит от плотности?

СОИСКАТЕЛЬ: Безусловно, это можно посчитать, но в данной работе такого разделения не сделано.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Что там играет большую роль?

СОИСКАТЕЛЬ: Большую роль, конечно, оказывает ковалентная связь,

поскольку она очень жесткая, направленная. Ван-дер-Ваальс очень легко разрушается, тем более под действием температуры. Чешуйки же сами по себе очень крепкие, когда их начинаешь сжимать сильнее, ковалентные связи слишком сильно сжать нельзя, структура начинает сопротивляться сжатию.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Вы посчитали теплопроводность. А соотношение конвективного и радиационного теплообмена? Казалось бы поверхность соприкосновения очень большая. Вы не оценивали?

СОИСКАТЕЛЬ: Поверхность тут не очень большая, но вклад конвективного и радиационного теплообмена не разделялся.

д.т.н. ВАЛИТОВ В.А.: Вы говорите, что возможно создание каких-то композитных материалов, например, с металлами. Для композитов основной параметр - это коэффициент термического расширения при соединении материалов, например, для солнечных батарей. Как ваши результаты с этим соотносятся?

СОИСКАТЕЛЬ: Известно уже, что графен имеет отрицательный коэффициент термического расширения и при соединении с подложками проявляются очень интересные эффекты. Предполагается применять графен именно там, где нужен отрицательный коэффициент термического расширения.

д.т.н. ВАЛИТОВ В.А.: Еще один вопрос – классические законы механики Ньютон разработал почти 300 лет назад для макромира. У вас для микромира действуют ли законы Ньютона или какие-то другие?

СОИСКАТЕЛЬ: Да, конечно. Я опустила это в докладе, но метод молекулярной динамики как раз основан на использовании закона Ньютона, т.е. атомы взаимодействуют по классическим законами, и уже сила их взаимодействия определяется потенциалом межатомного взаимодействия.

д.ф.-м.н. АСТАНИН В.В.: Юлия Айдаровна, при моделировании теплопроводности учитывалась только фононная составляющая или электронная тоже?

СОИСКАТЕЛЬ: Дело в том, что механизм теплопроводности в графене фононный, вклад электронов меньше 1%, это было показано ранее, поэтому рассматривается только вклад фононов. Исследования основываются на том, что на

этом материале можно в чистом виде изучить механизмы фононной теплопроводности, рассматривая фононные спектры.

д.т.н. ЛУТФУЛЛИН Р.Я.: Работа у вас сугубо теоретическая и в связи с этим возникает вопрос, когда будут востребованы эти результаты, как вы планируете? Год, два, десять?

СОИСКАТЕЛЬ: Сам графен, хотя я и упомянула, что он исследуется последние 10 лет, является очень молодым материалом, его пока не научились получать в промышленных масштабах. Но в лабораторных условиях графен используют уже для создания новых гибких прозрачных экранов для сенсорных устройств, например. Если эти новые устройства покажут лучшие характеристики, чем уже существующие, то это будет стимулировать область исследования и далее. Например, графен, обнаружен совсем недавно, и в основном исследователи борются над его получением, до реализации довольно далеко.

д.т.н. ЛУТФУЛЛИН Р.Я.: Но вообще она предполагается?

СОИСКАТЕЛЬ: Я думаю в ближайшие 10 лет мы подойдем гораздо ближе к практической реализации этого материала.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Есть еще вопросы? Нет. Коллеги, по положению мы можем сделать технический перерыв. Нужен нам перерыв? Если нет, то продолжаем. Спасибо Юлия Айдаровна, садитесь. Слово предоставляется научному консультанту – Дмитриеву Сергею Владимировичу.

НАУЧНЫЙ КОНСУЛЬТАНТ: (Научный консультант дал положительную характеристику диссертанту. Выступление в целом соответствует прилагаемому к стенограмме положительному отзыву).

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Спасибо. Слово предоставляется ученому секретарю для зачитания заключения организации, где выполнена работа, отзыва ведущей организации и отзывов на автореферат.

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ: Заключение организации, где была выполнена данная диссертация. В заключении описана оценка данной работы. Содержание диссертационной работы по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, подтверждается публикациями основных результатов в журналах

специализирующихся в данной области знаний, апробацией работы на соответствующих научных форумах, ее научной и практической значимостью. Материал исследован достаточно полно, изложен в 51 работе, опубликованных автором по теме диссертации в рецензируемых научных журналах и изданиях из списка ВАК и учебном пособии. Диссертация «Структура и физические свойства наноматериалов на основе графена» Баимовой Юлии Айдаровны рекомендована к защите на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния. Решение принято на заседании Ученого совета ИПСМ РАН, присутствовало на заседании 12 членов Ученого совета, за проголосовало – 11 чел., против – 0, воздержалось – 1 чел. Протокол № 10-16 от 08.06.2016.

д.ф.-м.н. АСТАНИН В.В.: Замечания (в заключении) есть?

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ: Замечаний нет.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Переходим к отзыву ведущей организации.

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ: На автореферат и диссертацию поступил отзыв от ведущего предприятия, назначенного решением диссертационного совета – ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет. (Отзыв кратко зачитывается). При положительном отзыве имеются семь замечаний:

1. Необходимо обосновать выбор материалов выбранных для исследования. Автор необоснованно считает такие разные углеродные материалы как графан, графен, фуллерены, инкапсулированные фуллерены, нанотрубки, гибридные структуры из sp^2+sp^3 из гибридизированных атомов материалами на основе графена. Следует точно обосновать принцип отнесения изученных в диссертации материалов к материалам на основе графена – что это за основа? Если это способ синтеза, то нанотрубки, фуллерены, гибридные кластеры и инкапсулированные фуллерены формируются из отдельных углеродных атомов и не получают напрямую из графена. Если же в основу отнесения наноматериалов к классу материалов на основе графена положена гибридизация атомов то в ряде материалов (графан, гибридные кластеры) она не sp^2 . Причем а одну группу материалов на основе графена, почему-то, включены материалы, состоящие

только из углеродных атомов и тут же приводятся материалы в составе которых имеются неуглеродные атомы.

2. В диссертации утверждается что “дефект 5-7- 5-7 незначительно снижает прочность графена на разрыв”. Поданным других авторов дефект Стоуна –Вэльса (5-7- 7-5) отвечает за пластическую деформацию в графеновых слоях с ролью аналогичной роли дислокаций в пластической деформации в трехмерных кристаллах. Скольжение дислокаций или дефекта 5-7- 7-5 приводит к уменьшению предельных напряжений разрыва на как минимум на порядок. Как объяснить это расхождение?

3. Допущение о существовании бризеров изученных в диссертации является гипотезой требующей экспериментального подтверждения. Какой эксперимент однозначно доказывающий или опровергающий существование бризеров может предложить автор?

4. Автору следует обосновать выбор методов расчета при молекулярно динамическом моделировании, почему расчеты выполнены молекулярно механическими методами, а не первопринципными квантово-механическими методами или хотя бы полуэмпирическими квантово-механическими? Как выбор молекулярно-механических методов влияет на достоверность полученных результатов?

5. Введенный соискателем термин графон является спорным. Существуют международные соглашения относительно способов обозначения химических соединений – суффиксы –ен(графен), -ан (графан), -ин (графин) используются не произвольно а по строгим правилам. Суффикс –он – окончание в систематических названиях кетонов. Очевидно, термин графон, использованный в диссертации, некорректный.

6. В выводе 7 заключения написано «Показано, что материалы со смешанной sp^2 - sp^3 гибридизацией обладают большей прочностью по сравнению с sp^2 -структурами, где структурные элементы взаимодействуют посредством слабых сил ван-дер-ваальса.». Однако в тексте диссертации об исследовании смешанных структур речи не шло.

7. В диссертации и автореферате имеются недочеты оформления и

опечатки, например, в автореферате диссертации ссылки на работы автора [32] и [35] приведены без указания, ссылка [50] приведена на еще не опубликованную работу; термин «валентные связи», встречающийся в автореферате и диссертации, вероятно, следует читать как «ковалентные связи».

На автореферат диссертации поступило 12 отзывов, все положительные. Разрешите зачитывать только замечания. Отзывы поступили от:

1. Заведующей кафедрой радиотехники и электродинамики ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», д.ф.-м.н., проф. **Глухой О.Е.** Отзыв положительный, имеются 6 замечаний: **1.** *На стр. 10 автореферата говорится, что в диссертации приводится «подробное описание...потенциалов Бреннера, Савина и Айребо». Тем не менее, в самом автореферате не только не приводится описание данных методов, но и даже отсутствуют ссылки. Это довольно удивительно, особенно, если говорить о потенциале Савина, который не является общеизвестным в научном сообществе. Кроме того, в ходе самого автореферата не указывается, какие именно методы расчета энергетического потенциала применяются к тем или иным объектам.* **2.** *На стр. 12 указано, что «межатомное расстояние в графене составляет 1.45Å». Насколько мне известно, общепринятым расстоянием для связи С-С в недеформированном графене является 1,42Å. Остается неясным, имеет ли здесь место банальная опечатка либо же это является следствием использованных автором методов. В любом случае, автору стоило разъяснить данный острый момент более подробно.* **3.** *На рис.4 показано, что в области (2) коэффициент Пуассона плоского графена отрицательный. Тем не менее из рисунка это не понятно. Например, значению относительного удлинения по оси x (ϵ_{xx}) 0.3 в области 2 соответствуют значения относительного удлинения вдоль оси y (ϵ_{yy}) в диапазоне [-0.1; 0.3]. Получается, что для диапазона значений [0; 0.3] коэффициент Пуассона не является отрицательным.* **4.** *Из автореферата остается непонятным, почему автор*

решил так подробно рассмотреть структуру графон-зигзаг. Как видно из работы, его свойства, в частности теплопроводящие, не отличаются от свойств обычного графена. 5. Не учтено влияние топологии внешней оболочки C540 на энергетические ямы C20@C540. Как известно, фуллерен C540 относится к фуллеренам типа Гольдберга и имеет икосаэдрическую симметрию. Такие фуллерены имеют три типа потенциальных ям с различными значениями энергии: 30 потенциальных ям с энергией E_1 , 12 – с энергией E_2 и 20 – с энергией E_3 , причем $E_1 > E_2 > E_3$. Автор пренебрегает этим фактором и рассматривает лишь случай, когда «C20 занимает равновесное положение в центре C540». 6. В качестве задач исследования автор называет «анализ влияния дефекта 5-7-5-7 на прочность графена на разрыв». В выводах автор отмечает, что «одиночный дефект 5-7-5-7 слабо понижает прочность графена на разрыв». Тем не менее, между разделом «задачи» и «выводы» фраза «дефект 5-7-5-7» не встречается. Остается лишь догадываться, что из себя представляет этот дефект и каким образом автор делает выводы о его влиянии на прочность графена.

2. Заведующего лабораторией механики прочности и разрушения материалов и конструкций ИПМех РАН, члена-корреспондента РАН, д.ф.-м.н., проф. **Гольдштейна Р.В.**, ведущего научного сотрудника лаборатории механики жидкостей ИПМех РАН, д.ф.-м.н., проф. **Городцова В.А.** и старшего научного сотрудника лаборатории механики прочности и разрушения материалов и конструкций ИПМех РАН, к.ф.-м.н. **Лисовенко Д.С.** Отзыв положительный, имеется 2 замечания: 1. На стр.17 сказано: «Графен в отсутствие деформации или при гидростатическом растяжении, $\epsilon_{xx}=\epsilon_{yy}\neq 0$, $\epsilon_{xy}=0$ является изотропной упругой средой, ...». Но изотропность растяжения не означает упругую изотропию графена. Упругость графена относится к гексагональной сингонии, т.е. он является упруго анизотропным! 2. На стр.17 написано: «Графен в отсутствие деформации или при гидростатическом растяжении, $\epsilon_{xx}=\epsilon_{yy}\neq 0$, $\epsilon_{xy}=0$, является изотропной упругой средой, а при негидростатическом

растяжении, $\epsilon_{xy}=0$, $\epsilon_{xx}\neq\epsilon_{yy}\neq 0$, - ортотропной средой. Отметим, что при других видах деформации графен преимущественно анизотропен.». Случаю ортотропной среды по терминологии кристаллофизики соответствует орторомбическая сингония. Поэтому при негидростатическом растяжении графен является анизотропным.

3. Доцента НИЯУ «МИФИ», к.ф.-м.н. **Катина К.П.** Отзыв положительный, имеется 3 замечания: **1.** На стр. 11 автореферата после формулы (2) ошибочно указано что dt это шаг по времени. Скорее всего, под dt подразумевается время за которое система получает количество теплоты $\Delta\zeta$. **2.** На стр. 12 автореферата указано, что межатомное расстояние в графене составляет 1,45 Å. Такое завышенное значение может быть связано с недостаточной точностью используемых эмпирических потенциалов, поскольку эксперимент и *ab initio* расчеты приводят к значению 1,42 Å. **3.** На рис. 9 (стр. 24 автореферата) на правом графике по оси Ox отложена общая длина. По всей видимости, имеется ввиду не общая длина, а расстояние от края листа до точки, в которой измеряется температура. Кроме того, этот график ошибочно отмечен номером а) вместо б).

4. Ведущего научного сотрудника НИО-2 «Физика прочности и интеллектуальные диагностические системы», проф. кафедры общей и теоретической физики ФГБОУ ВО «Тольяттинский государственный университет», д.ф.-м.н. **Ясникова И.С.** Отзыв положительный, имеется 2 замечания: **1.** Дефект 5-7- 5-7, упомянутый в автореферате является по сути дисклинационным диполем с экранированным полем упругих напряжений и не способен поменять гауссову кривизну углеродной плёнки [ФТТ, 40, 1178 (1998)] сохраняя её «плоское» состояние. Допускает ли метод молекулярной динамики прогнозирование механических свойств углеродных пленок с введенными в их структуру более сложными экранированными мультидисклинационными конфигурациями [ФТТ, 58, 1147 (2016)]? **2.** Кроме того, на мой взгляд, использование термина

«квазидвумерность» в случае наноматериалов на основе графена не вполне приемлемо, так как сама по себе квазидвумерность подразумевает частичную пространственную делокализацию физической системы в направлении третьего измерения (например, атомарный водород на плёнке сверхтекучего гелия). Наводораживание графена, на мой взгляд, не приводит к делокализации системы, но это скорее дискуссионный вопрос, касающийся выбора терминологии.

5. Профессора кафедры радиофизики и нелинейной динамики физического факультета ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского», д. ф.-м. н. **Четверикова А.П.** Отзыв положительный, имеется 2 замечания: *1. Наряду с описанием объектов исследования и используемых методов анализа стоило обозначить мировой уровень исследований в данной области, основные результаты, на которых базируется работа, и их авторов; 2. При описании результатов глав диссертации в автореферате стоило бы указать номера работ из списка публикаций автора, в которых соответствующие результаты представлены.*

6. Заведующего кафедрой общей и экспериментальной физики ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный университет», д.ф.-м.н., проф. **Плотникова В.А.** Отзыв положительный, 1 замечание: *в автореферате автор слабо отражает структуру и свойства алмазоподобных слоистых структур, хотя в выводах работы упоминает об этих структурах.*

7. Заведующего кафедрой физической и неорганической химии ФГБОУ ВО Алтайский государственный университет, д.ф.-м.н. **Безносюка С.А.** Отзыв положительный, имеются 2 замечания: *1. Не смотря на то, что метод молекулярной динамики является хорошо известным и апробированным методом исследования, в автореферате не достаточно полно обосновано использование именно этого метода. Автору следует обосновать почему данные расчеты выполнены молекулярно-механическими методами, а не первопринципными*

квантово-механическими методами или полуэмпирическими квантово-механическими? 2. В автореферате упоминается несколько конфигураций онионов, однако остается не ясным какие именно варианты структур были рассмотрены и на чем основан выбор, например, структуры $C_{20}@C_{80}$, показанной на рис. 3. Следовало бы пояснить это в автореферате более подробно.

8. Главного научного сотрудника ФГБУН Института высокотемпературной электрохимии УрО РАН, д.ф.-м.н. **Галашева А.Е.** Отзыв положительный, 4 замечания: 1. Напрашивается пояснение к правомерности использования формулы (5) для вычисления теплоемкости графена – двумерного материала. Точнее, вопрос касается множителя $3N$, отражающего число фононных мод в объемном кристалле. Для кристалла с двумя атомами в базисе (как у графена) размерность динамической матрицы должна быть 6×6 . Но моды, где колебания выводят атомы из плоскости графенового листа (*out-of plane modes*) отделяются и задача может быть приведена к плоской с размерностью динамической матрицы 4×4 . Кроме того, при рассмотрении механических свойств моды «*out-of-plane*» для графена автором фактически не принимаются во внимание. 2. На стр.17 автореферата указывается, что при гидростатическом растяжении коэффициент Пуассона ν графена становится отрицательным. Так как материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона способны расширяться/сужаться в направлении, перпендикулярном направлению растяжения/сжатия, то при $\nu < 0$, создаваемым гидростатическим растяжением, графен становится более волнистым или шероховатым. Но данные о рифлении или шероховатости в автореферате не представлены. Хотя логично было бы сопоставить, насколько хорошо полученные для области устойчивости графена значения относительных деформаций ϵ_{xx} , ϵ_{yy} согласуются с величиной атомных смещений в графене за пределы плоскости. 3. На стр. 23 дается неверная ссылка на формулу (3), тогда как следует сослаться на формулу (4). 4. На стр. 27, когда идет описание теплопередачи через границу двух сред,

представляемых однослойной гетероструктурой силицен/графен, вместо термина «поверхность» раздела, следовало бы использовать не вводящий в заблуждение термин «граница» раздела двух сред. В последнем абзаце главы 4 на этой же странице утверждается, что «При увеличении размера системы фононные моды с большой длиной волны не могут быть возбуждены». На самом деле справедливо обратное, т.е. длина волны фононной моды (коллективного колебания атомов) увеличивается с ростом размера системы. Следовательно, следующее далее объяснение замедления роста коэффициента тепло-передачи с увеличением длины слоя (рис. 10б) некорректно.

9. Заведующего отделом ОИВТ РАН, д.ф.-м.н. **Стегайлова В.В.** и главного научного сотрудника ОФИВТ РАН, д.ф.-м.н., проф. **Нормана Г.Э.** Отзыв положительный, без замечаний.

10. Заведующего кафедрой общей физики Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, д. ф.-м. н., проф., заслуженного деятеля науки РФ **Старостенкова М. Д.** Отзыв положительный, без замечаний.

11. Заведующего кафедрой «Высшая математика и математическое моделирование» Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, д. ф.-м. н., проф. **Полетаева Г.М.** Отзыв положительный, без замечаний.

12. Главного научного сотрудника лаборатории физики низкоразмерных систем ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный социально-педагогический университет», д.ф.-м.н., проф. **Крючкова С.В.** и доцента кафедры физики, методики преподавания физики и математики, ИКТ ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный социально-педагогический университет», к.ф.-м.н. **Кухаря Е.И.** Отзыв положительный, замечания отсутствуют.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Спасибо. Слово предоставляется соискателю для ответа на замечания.

СОИСКАТЕЛЬ: Отвечаю на замечания от ведущей организации. **1.**

Вообще говоря, название – материал на основе графена – было выбрано, поскольку для большинства исследованных структур графен является одним из основных строительных элементов. Это сам графен, гетероструктуры, где графен один из слоев, наводороженный графен, где водород осаждается на графен, скомканный графен где чешуйки графена - это основной структурный элемент, системы нанотрубок, где нанотрубки сворачиваются из листов графена. Возможно, следовало уточнить в названии, что часть структур построены на основе фуллерена, как отдельного строительного элемента, однако, в общем случае, материалы на основе фуллеренов также подходят под класс материалов на основе графена – фуллерен может быть образован из листа графена введением дефектов. **2.** Автор отзыва указывает, что этот дефект аналогичен дислокации, но, к сожалению, он не приводит пример работы, где показано скольжение такого дефекта. Дело в том, что дислокации действительно скользят в графене и это наблюдается экспериментально. Но дефект 5-7-5-7 это не дислокация, а дислокационный диполь. Ни в диссертации, ни в докладе я этого не упоминают, но я занималась исследованием такой конфигурации и показала, что эти дефекты подвижными не являются. **3.** В настоящее время такого эксперимента нет. Но целью моей работы не являлось предложение эксперимента. Исследование даже самых обычных свойств графана в настоящее время затруднено, поскольку не так просто осуществить его получение, не говоря уже о поиске дискретных бризеров. **4.** С замечанием согласна. Выбор метода исследования осуществлялся исходя из поставленных задач. В данной работе часть данных получена методом молекулярной статики – для расчета области устойчивости графена, и большая часть результатов методом молекулярной динамики. Кроме того, были использованы и аналитические расчеты. Безусловно, квантово-механические методы дают прекрасные количественные результаты, однако требуют и совсем другого подхода и других размеров рассматриваемых структур. Для поставленных в работе задач именно метод молекулярной динамики является наиболее эффективным способом решения – позволяет рассматривать большие образцы, например, объемные наноматериалы, позволяет хорошо визуализировать результаты, использовать менее затратные

методы расчета. В диссертации следовало более четко отметить данные преимущества метода молекулярной динамики. Более того, в данной работе показано сравнение результатов полученных другими авторами квантово-механическими методами, которое показало, что для ряда задач молекулярная динамика дает более реалистичные результаты. **5.** С замечанием согласна. В соответствии с указанной классификацией данный термин является не верным. Однако термин был введен не мной, и фигурировал в литературе до того, как я начала заниматься этим материалом. Поэтому я не меняла уже принятое название. **6.** Согласна с замечанием. В текст в данном случае закралась опечатка – речь идет о sp^3 структурах. **7.** С замечанием по оформлению согласна, в ссылке 35 действительно упущен номер статьи. Однако отмечу, что в ссылке 32 не упущена никакая информация, ссылка 50 приведена на опубликованную работу, поскольку на момент печати автореферата статье уже был присвоен DOI и ее можно было скачать на сайте журнала, приведение рядом с выходными данными (in press) указывает на то, что в бумажном варианте статья пока не была готова. Под термином валентные связи действительно понимается термин ковалентные связи, но поскольку общеизвестно, что в углеродных структурах связи между атомам ковалентные, я применяла и тот и другой термин. На будущее буду более тщательно следить за терминологией.

Отзыв д.ф.-м.н. **Глухой О.Е.** **1.** С замечанием согласна. Возможно следовало для каждой конкретной задачи указывать метод и потенциал, но было опущено, как более частная информация. Ссылки на потенциалы действительно не приведены, вероятно, это также упущение, но все же, потенциалы Бреннера и Айребо очень широко известны и не требуют дополнительных пояснений для исследователей, работающих в этой области. Работы, где был использован потенциал Савина, опубликованы в высокорейтинговых физических журналах, и профессор Савин является моим соавтором и в списке моих работ, приведенном в автореферате без труда можно обнаружить сведения об этом потенциале. Однако в соответствии и с некоторыми другими замечаниями из отзывов видно что следовало больше внимания в автореферате уделить не только результатам, но и

более подробному описанию методов и потенциалов. Учту на будущее. **2.** С замечанием согласна. Однако ошибка тут закралась не в вычисления, а в текст автореферата. Дело в том, что в работе было использовано три разных потенциала, причем для одного из потенциалов - потенциала Бреннера были использованы два набора параметров – стандартный и модифицированный. Именно потенциал Бреннера дает длину валентной связи $1,4505\text{\AA}$, которая указана в автореферате. Потенциал, разработанный А.В. Савиным, дает длину связи $1,418\text{\AA}$, а потенциал Айребо воспроизводит длину связи $1,42\text{\AA}$. В данном случае необходимо было привести в автореферате величину $1,42\text{\AA}$ или упомянуть, что величина $1,45\text{\AA}$ относится именно к потенциалу Бреннера. **3.** С замечанием согласна. Раз рисунок вызывает вопросы, следовательно, в автореферате необходимо было привести больше пояснений. Чтобы ответить на замечание продемонстрирую рисунок. Как видно, коэффициент Пуассона в названном диапазоне деформаций как раз отрицательный. **4.** Действительно, структура оказалась не самой интересной. Данная структура была выбрана случайным образом – таких структур в литературе еще не было показано. Выбор оказался не удачным, однако, именно в сравнении с полностью и наполовину наводороженными структурами. От чистого графена эта структура по своим свойствам отличается. В данном случае это хороший пример пользы от теоретического исследования. В эксперименте сейчас идет постоянный поиск новых наводороженных конфигураций. Как видно, получение именно этой структуры не рационально. **5.** С первой частью замечания согласна. В работе энергетические характеристики указанных структур вообще мало описаны, поскольку как раз в работах автора отзыва приведены довольно подробно. В диссертации есть ссылки на эти работы. Однако я согласна, что следовало остановиться на этом более подробно. Кроме того, в автореферате этот онион описан кратко, только наиболее интересный результат, но даже там показано, что не только равновесное центральное положение C_{20} было исследовано, а также положения в разных областях во внешнем фуллерене C_{540} . **6.** С замечанием согласна. Этот момент я в автореферате упустила, хотя в диссертации, безусловно, этот дефект и его влияние на прочность описаны достаточно подробно.

Отзыв чл.-корр., д.ф.-м.н. **Гольдштейна Р.В.**, д.ф.-м.н., проф. **Городцов В.А.**, к.ф.-м.н. **Лисовенко Д.С.** Оба указанных замечания касаются ошибочно употребляемой терминологии. С замечаниями, безусловно, согласна и в будущем постараюсь откорректировать применение указанных терминов.

Отзыв д.ф.-м.н., проф. **Ясникова И.С.** **1.** Это, я так понимаю, больше вопрос, чем замечание. Ответу: Дефект 5-7-5-7 является скорее дислокационным диполем, поскольку в литературе было показано, что подобием положительной и отрицательной дисклинации являются дефекты 5 и 7, а дефект 5-7 представляет собой дислокацию в графене. Исходя из такого подхода дефект 5-7-5-7 это дислокационный диполь. Действительно, он не меняет кривизну листа графена, сохраняя его плоское состояние. Метод молекулярной динамики неоднократно применялся для исследования поведения графена с дефектами, в том числе и для исследования механических свойств, например прочности или поведения при разрушении. При этом исследовались как одиночные дефекты, так и системы дефектов, однако, таких сложных конфигураций, как в названной в отзыве статье, я не встречала. Полагаю, что метод молекулярной динамики вполне позволяет моделировать подобные системы. **2.** Прежде чем выбрать такой термин я проработала литературу по этому вопросу, и оказалось, что в существующих уже публикациях употребляются совершенно различные термины для обозначения одних и тех же объектов. Поскольку термин квазидвумерные я посчитала подходящим, и этот термин применяется к таким структурам достаточно часто, я выбрала именно его.

Отзыв к.ф.-м.н. **Катина К.П.** **1.** С замечанием согласна. В тексте автореферата действительно оказалось неверное определение dt . **2.** На этот вопрос ответ был дан при ответе на отзыв Глуховой О.Е. (Ошибка тут закралась не в вычисления, а в текст автореферата. Дело в том, что в работе было использовано три разных потенциала, причем для одного из потенциалов - потенциала Бреннера были использованы два набора параметров – стандартный и модифицированный. Именно потенциал Бреннера дает длину валентной связи $1,4505\text{\AA}$, которая указана в автореферате. Потенциал, разработанный Савиным А.В., дает длину связи

1,418Å, а потенциал Айребо воспроизводит длину связи 1,42Å. В данном случае необходимо было привести в автореферате величину 1,42Å или упомянуть, что величина 1,45Å относится именно к потенциалу Бреннера) **3.** С замечаниями согласна. В силу симметрии структуры, действительно, показана не общая длина, а только половина – от края листа до точки в которой изменяется температура.

Отзыв д.ф.-м.н. **Галашева Е.А.** **1.** Они отделяются только в пределе малоамплитудных колебаний. Я рассматриваю довольно большие колебания и есть слабая связь между фоннными модами в плоскости и из плоскости листа графена, поэтому возможность такого редуцирования задачи представляется сомнительным. **2.** В данном случае отмечу, что речь идет об ауксетичности именно устойчивого плоского графена. То есть в данном диапазоне деформаций графен не может быть шероховатым или волнистым. При отрицательном коэффициенте Пуассона, который проявляется только тогда, когда графен уже некоторым образом деформирован, действительно происходит его уширение в направлении перпендикулярном направлению растяжения, но графен остается плоским. Поэтому сравнения, о котором упоминается в замечании, не дано. В данном случае, видимо, в автореферате не достаточно четко прописан этот момент, что ввело в заблуждение автора отзыва. Следовало более точно описать это в автореферате. **3.** С замечанием согласна. **4.** По поводу первой части замечания отмечу, что был выбран термин поверхность для того, чтобы унифицировать термины. Граница является частным случаем поверхности. По поводу второй части замечания – действительно справедливо обратное. Дальнейшее пояснение в автореферате как раз соответствует ситуации, когда возбуждаются больше длинноволновых фононов. Таким образом, во втором предложении второго абзаца опечатка. Следует читать «При увеличении размера системы могут быть возбуждены фоннные моды с большой длиной волны».

Отзыв д.ф.-м.н. **Безносюка С.А.** **1.** На первый вопрос ответ был дан при ответе на отзыв ведущей организации. **2.** Согласна с замечанием. В автореферате выбор структур описан очень кратко, следовало подробнее остановиться на этом моменте. Данные структуры ранее были теоретически описаны в литературе, кроме

того существуют экспериментальные работы, посвященные изучению слоистых структур. Поэтому выбор материалов исследования основан на литературных данных.

Отзыв д.ф.-м.н., проф. **Плотникова В.А.** С замечанием согласна. Стоило еще более подробно описать эти структуры.

Отзыв д.ф.-м.н. **Четверикова А.П. 1.** С замечанием согласна. В диссертации это представлено достаточно полно, однако в автореферате отмечено очень кратко.
2. С замечанием согласна.

У меня все.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Спасибо. Переходим к заслушиванию отзывов официальных оппонентов. Слово предоставляется официальному оппоненту д.ф.-м.н., профессору Екомасову Евгению Григорьевичу.

д.ф.-м.н. ЕКОМАСОВ Е.Г.: (Выступление в целом соответствует прилагаемому к стенограмме отзыву официального оппонента на диссертацию).
Замечания, имеющиеся в положительном отзыве:

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 9 работах) и К. Zhou (соавтор в 19 работах).

3. Во введении, а также далее по тексту показано, что дискретные бризеры могут влиять на некоторые физические свойства или процессы. Если для графена показано участие дискретных бризеров в разводораживании, 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 табл. 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 табл. 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 написание одного из журналов встречается в двух видах – *physica status solidi (b)* и *phys. Stat. solidi (b)*.*

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. Диссертационная работа отвечает требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертации на соискание ученой степени доктора наук согласно п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней». Считаю, что Баимова Юлия Айдаровна заслуживает присуждения ей степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Спасибо. Слово предоставляется Косевичу Юрию Арнольдовичу, официальному оппоненту.

д.ф.-м.н. КОСЕВИЧ Ю.А.: (Выступление в целом соответствует прилагаемому к стенограмме отзыву официального оппонента на диссертацию). Замечания, имеющиеся в положительном отзыве:

- 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 стр. 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 рис. 1.5.*
- 4. В связи с приведенной на рис. 1.6 схемой расчета теплопроводности 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 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.*

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Следующий официальный оппонент д.ф.-м.н. Овидько Илья Анатольевич. Он по уважительной причине отсутствует и мы должны заслушать его отзыв полностью.

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ: (зачитывает положительный отзыв официального оппонента д.ф.-м.н. Овидько И.А., который приводится в приложении). Отзыв положительный, имеются следующие замечания:

- 1. Автор в диссертации развивает теорию участия нелинейных объектов, дискретных бризеров, в разводоразживании графена. Возникает вопрос, в какой степени такой механизм разводоразживания, исследованный в модели с достаточно упрощенным потенциалом может оказаться реализуемым на*

практике.

2. Автор в своей работе неоднократно упоминает различные способы управления свойствами углеродных материалов, например графена. А также показано влияние дефекта 5-7- 5-7 на прочность графена. При этом автором никак не развивается мысль об управлении свойствами графена посредством введения дефектов. Кроме того, исследование всего лишь одного типа дефектов также является некоторым упущением. Было бы более рационально показать влияние на прочность и, возможно, некоторые другие свойства графена, как минимум пары видов дефектов. Такое дополнение отлично вписалось бы в общую концепцию управления свойствами наноструктуры, 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.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Спасибо. Юлия Айдаровна, Вам предоставляется слово для ответа на замечания оппонентов.

СОИСКАТЕЛЬ: Отзыв Екомасова Е.Г. **1.** С замечанием согласна. Действительно данная диссертация объединяет далеко не все структуры на основе

графена и посвящена исследованию в основном механических и физических свойств, а также нелинейных колебательных мод. Я объединила все исследованные мной свойства – механические, тепловые и нелинейные – под общим понятием «физические». Безусловно, можно было добавить в название больше детализации. В наноструктуры на основе графена я объединила все изученные материалы исходя из того, что, во-первых, было изучено большое их многообразие, во-вторых, материалы разной размерности и разного назначения, то есть в целом, многие под виды наноматериалов на основе графена представлены в данной работе. 2. С замечанием согласна. И в автореферате и во введении я достаточно сжато отметила вклад соавторов: в автореферате это была попытка сэкономить место, а в диссертации я выделила отдельную страницу благодарностей всем, кто внес вклад в эту работу. Отметила особо профессора Савина, поскольку многие задачи в работе были решены с использованием разработанных им потенциалов, и, возможно, самой работы без этого не случилось бы. Отвечу по поводу профессора Zhou – это профессор, который руководил моей работой в Сингапуре. Он является большим специалистом в исследовании микро и наномеханики материалов, и в исследовании свойств материалов теоретическими и расчетными методами. В качестве руководителя он занимался обсуждением со мной полученных результатов, участвовал в написании статей, однако не ставил мне задачи, работая там, я самостоятельно выбирала область исследования. Большой его вклад, безусловно, в том, что под его руководством я училась писать на английском языке. По поводу Е.А. Корзниковой – с ней мы работаем достаточно давно и с самого начала являлись равноправными коллегами. Часть наших совместных статей объединяет ее и мои результаты, полученные при работе в одном направлении, например, по дискретным бризерам или скомканному графену, часть – это результаты, полученные лично ей или мной, но при этом вместе мы активно участвовали в обсуждении этих результатов, поиске путей решения поставленных задач. В данной диссертации нет результатов, полученных лично Е.А. Корзниковой, только те результаты, которые были получены мной и при обсуждении которых она принимала участие. Скажу несколько слов о других моих

соавторах. Двое моих соавторов являются моими студентами, которые работали под моим руководством. Лисовенко Д.С. - это соавтор, который предоставил свои расчетные программы для исследования углеродных алмазоподобных фаз, однако, эти результаты он отдал в мое полное пользование, поскольку это не является его основной тематикой. Иван Лобзенко – это соавтор, который занимается дискретными бризерами, причем проводит расчеты методом DFT, что позволяет нам сравнивать результаты и получать более достоверные сведения. **3.** Согласно с замечанием. Следовало более полно остановиться на этом вопросе, поскольку уже было показано, что, например, возбуждение дискретного бризера в углеродной нанотрубке приводит к зарождению дефекта 5-7-5-7. В графене также дискретный бризер может приводить к подобным явлениям, возможно, активировать разрыв. Однако, поскольку этого в данной работе не доказано, я не стала останавливаться на этом в тексте диссертации, и оставила на уровне гипотезы участие дискретных бризеров в различных физических процессах. **4.** С замечанием согласна. В диссертации я довольно кратко обосновала выбор графона и графана в качестве материала исследования и мало внимания уделила описанию их свойств известных из литературы. К настоящему моменту имеются достаточно полные обзоры по различным наводороженным материалам, их структурам и свойствам и в обзорной части главы 2 следовало уделить этому больше внимания. **5.** Ответу на поставленный вопрос. Безусловно, квантово-механические методы являются достаточно точными и достоверными, позволяют исследовать многочисленные свойства различных материалов, получать хорошие количественные их оценки, во многих вопросах дают результаты лучше, чем молекулярная динамика. Тем не менее, в данном случае квантово-механическим методом были изучены гипотетические структуры, существование которых пока не показано. Авторами по этим структурам представлено достаточно много работ в которых они рассчитывают, в том числе, и объемный модуль, а также энергетические характеристики. Однако все эти расчеты проведены в статике, поэтому данные структуры и заинтересовали нас – будут ли они устойчивы и в динамике. Наши расчеты показали, что эти структуры не устойчивы. Именно это является причиной

разногласия в данных. Наши расчеты мы проводили двумя методами и для устойчивых структур различий не обнаружили, а вот для малоустойчивых – есть различия в данных. В данном случае, как мне кажется, два метода в симбиозе дали достаточно интересный и верный результат. Да, все структуры гипотетически могут существовать, но вот получить устойчивые структуры можно только для нескольких из них. **6.** С замечаниями согласна. Я старалась максимально аккуратно оформить диссертацию, но есть вот такие упущения.

Отзыв Косевича Ю.А. **1.** С замечанием согласна. Многие заметили, что эту тему в автореферате я упустила. **2.** С замечанием согласна. Я старалась внести различие в эти термины, однако в некоторых местах диссертации это упустила. **3.** Согласна с замечанием. Это утверждение было взято из литературы, как упоминает оппонент. В дальнейшем данное утверждение использоваться не будет. **4.** Как отметил оппонент, это наиболее часто используемая схема, поэтому была выбрана именно она. **5.** С замечанием согласна. К сожалению, при составлении обзора литературы эта публикация была упущена.

Отзыв Овидько И.А. **1.** С замечанием согласна. Пока экспериментальное доказательство малореализуемо, поскольку и само по себе экспериментальное исследование графана затруднено. Однако данная работа позволяет получить понимание вопроса разводораживания с довольно неожиданной стороны и показать возможность реализации такого нового механизма. Использованный потенциал, не смотря на существующие его недостатки, активно используется для моделирования подобных структур и является хорошо апробированным. **2.** С замечанием согласна. Действительно, существует теория управления свойствами наноструктур посредством введения дефектов – дислокаций или границ зерен. Эта теория вполне подтверждается и для графена. В обзорной части диссертации я ссылаюсь на работы по управлению свойствами графена посредством введения дефектов, но, действительно, очень кратко. В работе я остановилась на одном типе дефектов поскольку это, во-первых, один из самых часто наблюдаемых дефектов в графене, а во-вторых, поскольку в литературе исследование, например, вакансий или дефектов типа 5-8-5 и др. представлено достаточно широко. Поэтому исследовав

интересовавший меня аспект прочности, я на этом остановилась. **3.** С замечанием согласна. Следовало бы более полно описать процесс создания структур и, возможно, привести примеры собственных программных пакетов. **4.** Действительно, УАФ представляются достаточно интересными и перспективными объектами, однако, поскольку в данном исследовании мы показали, что часть этих фаз вообще не являются устойчивыми, а часть малоустойчивы, то дальнейшее исследование их свойств под влиянием каких-либо факторов не представляется перспективным. Наоборот, мы показали, что именно такие конфигурации наименее вероятны. **5.** С замечаниями по оформлению согласна.

У меня все. Спасибо.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Спасибо. Коллеги, объявляются прения. Пожалуйста, есть желающие выступить по результатам защиты? Фарид Зайнуллаевич, пожалуйста.

д.т.н. УТЯШЕВ Ф.З.: Я задал вопрос по упругим деформациям, показалось, что все-таки это не упругие свойства. Это какие-то другие деформации, а не совсем управление посредством упругой деформации. И считать ее надо не как обычную деформацию, а так как это было показано, может быть посредством искривлений. Но, в общем, я полагаю все замечательно. Я буду голосовать за.

д.ф.-м.н. НАЗАРОВ А.А.: Много я говорить не буду. По поводу вопроса и замечания Фарид Зайнуллаевича, может быть, отвечу. Юлия Айдаровна ответила, но, может быть, это не достаточно четко прозвучало. Все дело в том, чтобы приложением упругой деформации получить нужные свойства, потом деформацию не снимая. Другой вопрос как это сделать, т.е. в этой работе автор не задается вопросом как это осуществить. Метод позволяет исследовать разные свойства. Если мы осадим на подложку, как она предложила, то получится не совсем то, что она изучала. Но тут масса возможностей, много не изученного в самом графене. Было замечание, что мало изучались дефекты, но это совсем отдельное направление. Сначала нужно изучить одиночные дефекты, потом дислокации, далее и границы зерен, которые там очень красивые, много интересных эффектов. Но это, возможно, для будущей работы. По-поводу диссертации: я считаю, что докторская диссертация созрела, сделан большой объем работ, все хорошо

опубликовано. Поэтому мы можем, не взирая на столь юный возраст, голосовать за подтверждение докторской степени Юлии Айдаровны.

д.ф.-м.н. АСТАНИН В.В.: Каждая работа всегда вызывает много вопросов. Например, при расчете теплопроводности как-то не увиделось, как был учтен масштабный фактор. Мне показалось, что те закономерности, которые были использованы они больше для бесконечных сред, чем для нанообъектов. Но чем богаты, тем и рады, это уже естественно. Если говорить о квалификационной составляющей, то Юлия Айдаровна бросила большой пласт работ, которые тоже очень интересны, связаны с моделированием механизмов пластической деформации, которые нам помогли понять, что такое зернограничное проскальзывание. И то, что она нашла в себе силы отбросить большую часть работы и сосредоточится на другой проблеме говорит о том, что она очень твердо стоит на ногах, как ученый, и я призываю голосовать за.

д.т.н. ЛУТФУЛЛИН Р.Я.: С одной стороны работа сугубо теоретическая и это здорово, поскольку теоретики фонариком освещают путь экспериментатору: куда идти, что делать. Но с другой стороны, экспериментаторы могут сказать – слишком далеко ушли, настолько далеко, что и проверить трудно. Но работа мне понравилась и своей постановкой и тем, что соответствует докторскому уровню, дает новые теоретические положения. Что я хотел бы порекомендовать – это то, что эти данные надо представить в виде курса лекций, описать это и т.д., чтобы это было широко известно. А по квалификационным характеристикам работа идеальна, и опубликована хорошо, и я буду голосовать за.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Юлия Айдаровна, видимо, предвосхищая это пожелание, издала учебное пособие по углеродным материалам, и с нового года будет читать курс лекций. Будем еще обсуждать? Заключительное слово предоставляется соискателю.

СОИСКАТЕЛЬ: Я хочу поблагодарить членов диссертационного совета, председателя за то, что Вы так внимательно выслушали мою работу, обсудили ее, задали интересные вопросы, сделали замечания. Хочу сказать спасибо моему научному консультанту за помощь, и всем тем, кто помогал мне в написании этой

работы. Большое спасибо.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Спасибо. Переходим к формированию счетной комиссии. Какие есть предложения?

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ: В счетную комиссию предлагаются: Астанин В.В., Лутфуллин Р.Я., Имаев В.М.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Есть другие предложения, вопросы? Если нет, то голосуем. Кто «за», «против», «воздержался»? Счетная комиссия избирается единогласно. Комиссия может приступить к работе. (Объявляется перерыв для тайного голосования).

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Слово предоставляется председателю счетной комиссии.

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ СЧЕТНОЙ КОМИССИИ д.ф.-м.н. АСТАНИН В.В. оглашает протокол счетной комиссии с результатами тайного голосования по присуждению ученой степени доктора физико-математических наук Баимовой Юлии Айдаровне.

РЕЗУЛЬТАТЫ ГОЛОСОВАНИЯ: Роздано 15 бюллетеней, после голосования в урне оказалось 15 бюллетеней, из них:

за присуждение ученой степени доктора физико-математических наук Баимовой Юлии Айдаровне	14
против	0
недействительных бюллетеней	1

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: Кто за утверждение решения счетной комиссии? За – 15, против - нет, воздержавшихся - нет. Протокол счетной комиссии утверждается советом единогласно. Юлия Айдаровна, поздравляем вас с положительным голосованием. Необходимо обсудить и принять проект заключения по диссертации Баимовой Юлии Айдаровны. Проекты заключения розданы. Если есть замечания, предлагаю обсудить.

(Члены совета обсуждают проект заключения, вносят изменения).

ПРЕДСЕДАТЕЛЬ: На утверждение предлагается заключение с учетом замечаний. Кто за это предложение? Прошу голосовать. За - 15, против - нет, воздержавшихся - нет.

Текст заключения принимается в соответствии с Приложением №4 к Положению о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание степени доктора наук, утвержденному приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 13 января 2014 г. №7 в следующей редакции:

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.080.03
на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук (ФГБУН ИПСМ РАН) по диссертации на соискание ученой степени доктора наук

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 3 ноября 2016 г., протокол №15/16

О присуждении Баимовой Юлии Айдаровне, гражданину РФ, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Структура и физические свойства наноматериалов на основе графена» по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния» принята к защите 7 июля 2016 г., протокол № 11/16, диссертационным советом Д 002.080.03 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, 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 Баимова Юлия Айдаровна, 1987 года рождения.

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Влияние упругой деформации на механические свойства графена, его линейные и нелинейные колебательные моды» защитила в 2014 году в диссертационном совете Д 002.080.02, созданном на базе ФГБУН ИПСМ РАН.

Соискатель работает старшим научным сотрудником в лаборатории

цветных сплавов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики металлов Уральского отделения Российской академии наук, а также по совместительству старшим научным сотрудником лаборатории 09 «Нелинейная физика и механика материалов» Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук.

Диссертация выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, в лаборатории 09 «Нелинейная физика и механика материалов».

Научный консультант – доктор физико-математических наук, **Дмитриев Сергей Владимирович**, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук, заведующий лабораторией 09 «Нелинейная физика и механика материалов».

Официальные оппоненты:

1. **Овидько Илья Анатольевич**; доктор физико-математических наук; профессор; заведующий лабораторией Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», г. Санкт-Петербург;

2. **Косевич Юрий Арнольдович**; доктор физико-математических наук; ведущий научный сотрудник лаборатории физики и механики полимеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, г. Москва;

3. **Екомасов Евгений Григорьевич**; доктор физико-математических наук; профессор кафедры теоретической физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Башкирский

государственный университет», г. Уфа.

дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Челябинский государственный университет», г. Челябинск, в своем положительном заключении, подписанном профессором кафедры физики конденсированного состояния ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет», доктором физико-математических наук **Беленковым Евгением Анатольевичем**, указала, что диссертационная работа Баимовой Ю.А. выполнена на актуальную тему и представляет собой логически выстроенную и завершенную научно-исследовательскую работу.

Соискатель имеет 96 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 51 работу, из них 50 опубликованы в рецензируемых научных изданиях из перечня ВАК РФ и в ведущих международных журналах. Пятьдесят публикаций по теме диссертации являются научными статьями и одна учебным пособием, написанными лично автором (либо при его непосредственном участии) их общий объём – 29 печатных листов.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Заведующего кафедрой общей физики Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, д. ф.-м. н., проф., заслуженного деятеля науки РФ **Старостенкова М. Д.** Отзыв положительный, без замечаний.

2. Заведующего кафедрой «Высшая математика и математическое моделирование» Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова, д. ф.-м. н., проф. **Полетаева Г.М.** Отзыв положительный, без замечаний.

3. Профессора кафедры радиофизики и нелинейной динамики физического факультета ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского», д. ф.-м. н.

Четверикова А.П. Отзыв положительный, имеется 2 замечания: **1.** Наряду с описанием объектов исследования и используемых методов анализа стоило обозначить мировой уровень исследований в данной области, основные результаты, на которых базируется работа, и их авторов; **2.** При описании результатов глав диссертации в автореферате стоило бы указать номера работ из списка публикаций автора, в которых соответствующие результаты представлены.

4. Заведующего лабораторией механики прочности и разрушения материалов и конструкций ИПМех РАН, члена-корреспондента РАН, д.ф.-м.н., проф. **Гольдштейна Р.В.**, ведущего научного сотрудника лаборатории механики жидкостей ИПМех РАН, д.ф.-м.н., проф. **Городцова В.А.** и старшего научного сотрудника лаборатории механики прочности и разрушения материалов и конструкций ИПМех РАН, к.ф.-м.н. **Лисовенко Д.С.** Отзыв положительный, имеется 2 замечания: **1.** На стр.17 сказано: «Графен в отсутствие деформации или при гидростатическом растяжении, $\varepsilon_{xx}=\varepsilon_{yy}\neq 0$, $\varepsilon_{xy}=0$ является изотропной упругой средой, ...». Но изотропность растяжения не означает упругую изотропию графена. Упругость графена относится к гексагональной сингонии, т.е. он является упруго анизотропным! **2.** На стр.17 написано: «Графен в отсутствие деформации или при гидростатическом растяжении, $\varepsilon_{xx}=\varepsilon_{yy}\neq 0$, $\varepsilon_{xy}=0$, является изотропной упругой средой, а при негидростатическом растяжении, $\varepsilon_{xy}=0$, $\varepsilon_{xx}\neq\varepsilon_{yy}\neq 0$, - ортотропной средой. Отметим, что при других видах деформации графен преимущественно анизотропен.». Случаю ортотропной среды по терминологии кристаллофизики соответствует орторомбическая сингония. Поэтому при негидростатическом растяжении графен является анизотропным.

5. Главного научного сотрудника лаборатории физики низкоразмерных систем ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный социально-педагогический университет», д.ф.-м.н., проф. **Крючкова С.В.** и доцента кафедры физики, методики преподавания физики и математики, ИКТ ФГБОУ ВО «Волгоградский

государственный социально-педагогический университет», к.ф.-м.н. **Кухаря Е.И.** Отзыв положительный, замечания отсутствуют.

6. Ведущего научного сотрудника НИО-2 «Физика прочности и интеллектуальные диагностические системы», проф. кафедры общей и теоретической физики ФГБОУ ВО «Тольяттинский государственный университет», д.ф.-м.н. **Ясникова И.С.** Отзыв положительный, имеется 2 замечания: **1.** Дефект 5-7- 5-7, упомянутый в автореферате, является по сути дисклинационным диполем с экранированным полем упругих напряжений и не способен поменять гауссову кривизну углеродной плёнки [ФТТ, 40, 1178 (1998)] сохраняя её «плоское» состояние. Допускает ли метод молекулярной динамики прогнозирование механических свойств углеродных пленок с введенными в их структуру более сложными экранированными мультидисклинационными конфигурациями [ФТТ, 58, 1147 (2016)]? **2.** Кроме того, на мой взгляд, использование термина «квазидвумерность» в случае наноматериалов на основе графена не вполне приемлемо, так как сама по себе квазидвумерность подразумевает частичную пространственную делокализацию физической системы в направлении третьего измерения (например, атомарный водород на плёнке сверхтекучего гелия). Наводораживание графена, на мой взгляд, не приводит к делокализации системы, но это скорее дискуссионный вопрос, касающийся выбора терминологии.

7. Главного научного сотрудника ФГБУН Института высокотемпературной электрохимии УрО РАН, д.ф.-м.н. **Галашева А.Е.** Отзыв положительный, 4 замечания: **1.** Напрашивается пояснение к правомерности использования формулы (5) для вычисления теплоемкости графена – двумерного материала. Точнее, вопрос касается множителя $3N$, отражающего число фононных мод в объемном кристалле. Для кристалла с двумя атомами в базисе (как у графена) размерность динамической матрицы должна быть 6×6 . Но моды, где колебания выводят атомы из плоскости графенового листа (out-of plane modes) отделяются и задача может

быть приведена к плоской с размерностью динамической матрицы 4×4 . Кроме того, при рассмотрении механических свойств моды «out-of-plane» для графена автором фактически не принимаются во внимание. **2.** На стр.17 автореферата указывается, что при гидростатическом растяжении коэффициент Пуассона ν графена становится отрицательным. Так как материалы с отрицательным коэффициентом Пуассона способны расширяться/сужаться в направлении, перпендикулярном направлению растяжения/сжатия, то при $\nu < 0$, создаваемым гидростатическим растяжением, графен становится более волнистым или шероховатым. Но данные о рифлении или шероховатости в автореферате не представлены. Хотя логично было бы сопоставить, насколько хорошо полученные для области устойчивости графена значения относительных деформаций ϵ_{xx} , ϵ_{yy} согласуются с величиной атомных смещений в графене за пределы плоскости. **3.** На стр. 23 дается неверная ссылка на формулу (3), тогда как следует сослаться на формулу (4). **4.** На стр. 27, когда идет описание теплопередачи через границу двух сред, представляемых однослойной гетероструктурой силицен/графен, вместо термина «поверхность» раздела, следовало бы использовать не вводящий в заблуждение термин «граница» раздела двух сред. В последнем абзаце главы 4 на этой же странице утверждается, что «При увеличении размера системы фононные моды с большой длиной волны не могут быть возбуждены». На самом деле справедливо обратное, т.е. длина волны фононной моды (коллективного колебания атомов) увеличивается с ростом размера системы. Следовательно, следующее далее объяснение замедления роста коэффициента теплопередачи с увеличением длины слоя (рис. 10б) некорректно.

8. Доцента НИЯУ «МИФИ», к.ф.-м.н. **Катина К.П.** Отзыв положительный, имеется 3 замечания: **1.** На стр. 11 автореферата после формулы (2) ошибочно указано что dt это шаг по времени. Скорее всего, под dt подразумевается время, за которое система получает количество теплоты $\Delta\xi$. **2.** На стр. 12 автореферата

указано, что межатомное расстояние в графене составляет 1,45 Å. Такое завышенное значение может быть связано с недостаточной точностью используемых эмпирических потенциалов, поскольку эксперимент и *ab initio* расчеты приводят к значению 1,42 Å. 3. На рис. 9 (стр. 24 автореферата) на правом графике по оси Ox отложена общая длина. По всей видимости, имеется в виду не общая длина, а расстояние от края листа до точки, в которой измеряется температура. Кроме того, этот график ошибочно отмечен номером а) вместо б).

9. Заведующего кафедрой физической и неорганической химии ФГБОУ ВО Алтайский государственный университет, д.ф.-м.н. **Безносюка С.А.** Отзыв положительный, имеются 2 замечания: 1. Не смотря на то, что метод молекулярной динамики является хорошо известным и апробированным методом исследования, в автореферате не достаточно полно обосновано использование именно этого метода. Автору следует обосновать почему данные расчеты выполнены молекулярно-механическими методами, а не первопринципными квантово-механическими методами или полуэмпирическими квантово-механическими? 2. В автореферате упоминается несколько конфигураций онионов, однако остается не ясным какие именно варианты структур были рассмотрены и на чем основан выбор, например, структуры $C_{20}@C_{80}$, показанной на рис. 3. Следовало бы пояснить это в автореферате более подробно.

10. Заведующей кафедрой радиотехники и электродинамики ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», д.ф.-м.н., проф. **Глухой О.Е.** Отзыв положительный, имеются 6 замечаний: 1. На стр. 10 автореферата говорится, что в диссертации приводится «подробное описание...потенциалов Бреннера, Савина и Айребо». Тем не менее, в самом автореферате не только не приводится описание данных методов, но и даже отсутствуют ссылки. Это довольно удивительно, особенно, если говорить о потенциале Савина, который не является общеизвестным в научном сообществе. Кроме того, в ходе самого автореферата не указывается, какие именно методы расчета энергетического потенциала

применяются к тем или иным объектам. 2. На стр. 12 указано, что «межатомное расстояние в графене составляет 1,45А». Насколько мне известно, общепринятым расстоянием для связи С-С в недеформированном графене является 1,42А. Остается неясным, имеет ли здесь место банальная опечатка либо же это является следствием использованных автором методов. В любом случае, автору стоило разъяснить данный острый момент более подробно. 3. На рис.4 показано, что в области (2) коэффициент Пуассона плоского графена отрицательный. Тем не менее, из рисунка это не понятно. Например, значению относительного удлинения по оси x (ϵ_{xx}) 0.3 в области 2 соответствуют значения относительного удлинения вдоль оси y (ϵ_{yy}) в диапазоне [-0.1; 0.3]. Получается, что для диапазона значений [0; 0.3] коэффициент Пуассона не является отрицательным. 4. Из автореферата остается не понятным, почему автор решил так подробно рассмотреть структуру графон-зигзаг. Как видно из работы, его свойства, в частности теплопроводящие, не отличаются от свойств обычного графена. 5. Не учтено влияние топологии внешней оболочки C540 на энергетические ямы C20@C540. Как известно, фуллерен C540 относится к фуллеренам типа Гольдберга и имеет икосаэдрическую симметрию. Такие фуллерены имеют три типа потенциальных ям с различными значениями энергии: 30 потенциальных ям с энергией E1, 12 – с энергией E2 и 20 – с энергией E3, причем E1>E2>E3. Автор пренебрегает этим фактором и рассматривает лишь случай, когда «C20 занимает равновесное положение в центре C540». 6. В качестве задач исследования автор называет «анализ влияния дефекта 5-7-5-7 на прочность графена на разрыв». В выводах автор отмечает, что «одиночный дефект 5-7-5-7 слабо понижает прочность графена на разрыв». Тем не менее, между разделом «задачи» и «выводы» фраза «дефект 5-7-5-7» не встречается. Остается лишь догадываться, что из себя представляет этот дефект и каким образом автор делает выводы о его влиянии на прочность графена.

11. Заведующего кафедрой общей и экспериментальной физики ФГБОУ ВПО «Алтайский государственный университет», д.ф.-м.н., проф. **Плотникова В.А.** Отзыв положительный, 1 замечание: в автореферате автор слабо отражает структуру и свойства алмазоподобных слоистых структур, хотя в выводах работы

упоминает об этих структурах.

12. Заведующего отделом ОИВТ РАН, д.ф.-м.н. **Стегайлова В.В.** и главного научного сотрудника ОФИВТ РАН, д.ф.-м.н., проф. **Нормана Г.Э.** Отзыв положительный, без замечаний.

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

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.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана научная концепция управления физическими и механическими свойствами графена и наноматериалов на его основе посредством деформирования или химического модифицирования;

предложена оригинальная гипотеза разводораживания графена посредством возбуждения дискретных бризеров;

показана перспективность применения наноструктур на основе графена для создания различных устройств с улучшенными свойствами;

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказаны положения, вносящие вклад в расширение представлений об углеродных материалах в общем, и наноструктур на основе графена в частности, их структуре, свойствах и возможностях управления их свойствами;

применительно к проблематике диссертации результативно использован метод молекулярной динамики с использованием трех различных потенциалов межатомного взаимодействия;

изложены условия изменения фононного спектра графена посредством

деформирования и химического модифицирования, изменения скоростей звука посредством деформирования и условия формирования корругированного графена со складками с заданными параметрами;

раскрыты возможности применения водорода для изменения физических свойств не только графена, но гетероструктур на его основе;

изучено большое многообразие двумерных и трехмерных материалов на основе графена, показаны их структурные особенности и свойства;

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

разработана общая методика расчета теплопроводности и теплопередачи в квазидвумерных структурах на основе графена и второго материала с решеткой, подобной решетке графена;

определены устойчивые структурные состояния для различных конфигураций слоистых структур, а также углеродных алмазоподобных фаз;

создана система практических рекомендаций по управлению параметрами одномерных складок корругированного графена;

представлены рекомендации по управлению механическими свойствами скомканного графена и некоторых других трехмерных материалов на основе графена посредством неупругой деформации.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

теоретические результаты получены с помощью как стандартных, так и специально написанных вычислительных программ, в которых были использованы хорошо апробированные межатомные потенциалы;

идеи базируются на достаточно известных подходах, например, технологии упругих деформаций, которая ранее к рассмотренным в диссертации материалам не применялась, а также на экспериментальных данных по уже изученным особенностям наноструктур на основе графена, которые определяли направление

исследований в данной работе;

использовано сравнение полученных в диссертации данных с уже известными из литературы экспериментальными данными, а также результатами теоретических исследований таких или подобных систем;

установлено качественное совпадение авторских результатов с результатами, представленными в литературе, например, критических значений деформации для высокосимметричных направлений упругой деформации графена, фононного спектра графена и графана в отсутствие деформации; величины коэффициентов теплопередачи для двухслойных гетероструктур сравнимы с теми же величинами подобных гетероструктур;

использованы современные методики сбора и статистической обработки исходной и полученной информации, а также эффективные методы визуализации.

Личный вклад соискателя заключается в выборе направления исследования, постановке задач и разработке плана работ, подготовке программ для проведения расчетов, обработке и анализе полученных результатов и последующем оформлении их в виде научных публикаций. Все этапы численных экспериментов выполнены лично соискателем, либо при его активном участии.

На заседании 3 ноября 2016 г. диссертационный совет принял решение присудить Баимовой Ю.А. ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве «15» человек, из них «6» докторов наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния», «9» докторов наук по специальности 05.16.01 – «Металловедение и термическая обработка металлов и сплавов», участвовавших в заседании, из «20» человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждении ученой степени – «14», против присуждения ученой степени – «0», недействительных бюллетеней – «1».

Председатель диссертационного совета,

д. ф.-м. н.

Рафикович

Мулюков

Радик

Ученый секретарь диссертационного совета,

д. ф.-м. н.

Фаниревич

Имаев

Марсель

7 ноября 2016 г.