

На правах рукописи

АХМАТОВ ЗЕЙТУН АНУАРОВИЧ

**ВЛИЯНИЕ МНОГОЧАСТИЧНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ
НА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ И КОЛЕБАТЕЛЬНУЮ ДИНАМИКУ
ГРАФЕНОПОДОБНЫХ СТРУКТУР**

Специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

НАЛЬЧИК
2018

Работа выполнена на кафедре теоретической и экспериментальной физики ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова»

Научный руководитель: доктор физико-математических наук,
профессор **Хоконов Азамат Хазрет-Алиевич**
ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский
государственный университет
им. Х.М. Бербекова» (г. Нальчик)

Официальные оппоненты: **Самсонов Владимир Михайлович,**
доктор физико-математических наук,
профессор, ФГБОУ ВО «Тверской
государственный университет» (г. Тверь)

Борлаков Хыйса Шамилович,
доктор физико-математических наук,
профессор, ФГБОУ ВО «Северо-Кавказская
государственная гуманитарно-технологическая
академия» (г. Черкесск)

Ведущая организация: ФГАОУ ВО «Южный федеральный
университет» (г. Ростов-на-Дону)

Защита диссертации состоится «05» декабря 2018 г. в 13:00 на заседании диссертационного совета Д 212.076.02 созданного на базе ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» по адресу: 360004, КБР, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» и на сайте <http://diser.kbsu.ru>.

Автореферат разослан «_____» _____ 2018 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета

Ахкубеков Анатолий Амишевич

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. В течение последних десятилетий углеродные материалы и наноструктуры на их основе находят все более широкое применение. Наиболее привлекательными являются электронные свойства графеноподобных структур (ГС), в частности, гигантская подвижность зарядов, на два порядка превышающая подвижность зарядов в кремнии. Тем не менее, из-за большого количества структурных дефектов при получении ГС до сих пор не удается успешно решать многие важные задачи, связанные с их применением в наноэлектронике и микросенсорике. Поэтому актуальным является получение высококачественных чистых и интеркалированных ГС. Рамановская спектроскопия зарекомендовала себя как один из наиболее перспективных методов идентификации углеродных, кремниевых и других полупроводниковых графеноподобных материалов. Формирование рамановских пиков, их положение и форма обусловлены особенностями взаимодействия электронной и фононной подсистем указанных соединений. Рамановские спектры позволяют определять наличие краевых дефектов и количество слоев в многослойном графене. Успешное решение задачи получения совершенных ГС структур предъявляет высокие требования к пониманию структурных и динамических свойств ГС. Этому могут способствовать появившиеся в последнее десятилетие мощные компьютерные ресурсы с параллельной реализацией методов молекулярной динамики. При этом имеется возможность использовать различные многочастичные потенциалы и при необходимости модифицировать входящие в них параметры, добиваясь адекватного описания экспериментальных данных, относящихся к уравнению состояния и колебательной динамике.

Моделирование, проводимое на высокопроизводительном компьютере, позволяет работать с большим числом атомов (от сотен тысяч до десятков миллионов частиц), что достаточно для перехода к термодинамическому пределу. Корректный учет многочастичных взаимодействий при выводе уравнения состояния из молекулярно-динамических данных становится нетривиальным даже в случае относительно простых систем, таких как инертные газы. В частности, это касается метода получения уравнения состояния с помощью вириала силы. Поэтому развитие методов получения уравнения состояния на случай многочастичных взаимодействий позволит достичь лучшего понимания физических процессов в ГС и оптимизировать технологию их получения.

Цель работы. Исследовать влияние многочастичных потенциалов на уравнение состояния инертных газов и колебательную динамику графеноподобных структур.

Для достижения поставленной цели ставились следующие задачи.

1. Разработать методику получения уравнения состояния для плотных газов и их смесей с учетом поляризационного трехчастичного взаимодействия. Определить вклад в уравнение состояния трехчастичных взаимодействий, проанализировать распределение кластеров по числу частиц в начале процесса конденсации.

2. Получить уравнение состояния для плотной Коб-Андерсеновской смеси инертных газов.

3. Установить потенциал, объясняющий экспериментальные данные по динамике решетки графена и обеспечивающий устойчивость решетки при больших амплитудах поперечных колебаний.

4. На основе квантово-химических методов и классической молекулярной динамики построить дисперсионные кривые и плотности фононных состояний для монослойных и многослойных графеноподобных структур. Получить для графена упругие постоянные и параметры Грюнайзена.

5. Провести идентификацию графеноподобных структур, выращенных методом химического осаждения из газовой фазы, по данным рамановского рассеяния.

6. Методом молекулярной динамики изучить процесс релаксации решетки при интеркаляции графита атомами металлов.

7. Определить эффективность интеркаляции графита атомами калия с помощью измерения гамма активности изотопа К-40 в низкофоновых условиях Баксанской нейтринной обсерватории (БНО).

Научная новизна исследований.

1. Предложена новая методика получения уравнения состояния для плотных газов и их смесей, основанный на использовании вириала силы с учетом трехчастичного взаимодействия.

2. Обнаружен эффект покомпонентного расслоения Коб-Андерсеновской газовой смеси криптона и ксенона вблизи точки конденсации.

3. Методом молекулярной динамики выявлено, что при использовании потенциалов типа Терсофа происходит раскачка изгибных колебаний графена мембранного типа до амплитуд, которые могут составить 10^{-2} длины образца, что значительно превышает амплитуду тепловых колебаний атомов.

4. На основе квантово-химических методов и классической молекулярной динамики получены плотности фононных состояний и дисперсионные кривые для монослойных и многослойных графеноподобных структур.

5. Методом химического осаждения из газовой фазы на сапфировую подложку получены и идентифицированы с помощью рамановской спектроскопии однослойный и многослойный графен.

6. Эффективность интеркаляции графита атомами калия впервые определена на основе измерения гамма-активности изотопа К-40 в низкофоновых условиях.

Научные положения, выносимые на защиту.

1. Методика получения уравнения состояния и критических параметров инертных газов с учетом трехчастичных взаимодействий, основанная на использовании вириала силы.

2. Уравнение состояния Коб-Андерсеновской смеси инертных газов и эффект ее покомпонентного расслоения вблизи точки конденсации.

3. Универсальный характер распределения частиц по кластерам в зависимости от параметра ранжирования кластеров по размерам.

4. Упругие постоянные и параметр Грюнайзена для графена, полученные методом МД с использованием потенциалов типа Терсофа.

5. Эффект раскачки поперечных акустических колебаний графена в изотермическом процессе до изгибных колебаний мембранного типа с аномально большими амплитудами, составляющими 10^{-2} длины всего образца.

6. Методика идентификации графеноподобных структур, полученных методом химического осаждения из газовой фазы, по данным рамановского рассеяния на основе компьютерного моделирования динамических и электронных свойств ГС.

7. Молекулярно-динамическая модель релаксационных процессов, сопровождающих интеркаляцию высокоориентированного пиролитического графита атомами металлов из газовой фазы.

8. Неразрушающий метод определения эффективности интеркаляции графита калий содержащими соединениями, основанный на низкофоновых измерениях гамма-активности изотопа К-40.

Теоретическая и практическая значимость работы. Развита метод изотопных маркеров применительно к контролю эффективности технологии интеркаляции и определения качества интеркалированных соединений. Результаты проведенных исследований позволят оптимизировать условия и технологии получения высококачественных графеноподобных структур. Метод идентификации может найти применение для отбора образцов с определенной структурой и степенью совершенства после их выращивания различными методами. Учет многочастичных взаимодействий позволяет получать при моделировании ГС с устойчивыми решетками и находить характерные частоты колебаний, что важно для их идентификации по рамановским спектрам.

Достоверность и обоснованность результатов. Результаты и следствия их них согласуются с современными экспериментальными и теоретическими данными. Полученные в диссертации результаты докладывались на международных и российских конференциях. Используемые установки, приборы и программное обеспечение представляются современными и хорошо себя зарекомендовавшими.

Объем и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав, выводов и списка литературы, включающего 133 наименований. Материал изложен на 149 страницах и проиллюстрирован 73 рисунками и 12 таблицами.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы были апробированы на следующих международных и всероссийских конференциях.

1. Международная сессия-конференция Секции ядерной физики ОФН РАН «Физика фундаментальных взаимодействий», посвященная 50-летию Баксанской нейтринной обсерватории, 6–8 июня 2017 г, Кабардино-Балкарский Государственный Университет, г. Нальчик. Тема «Low-background isotope markers method for studies of potassium-graphite intercalated compounds».

2. XXXII Международная конференция «Взаимодействие интенсивных потоков энергии с веществом», 1–6 марта 2017 г., Эльбрус, Кабардино-Балкария. Тема «Simulation of hydrogen and deuterium storage in graphite-potassium intercalation compounds».

3. IV Международная научно-практическая конференция «Прикладные аспекты геологии, геофизики и геоэкологии с использованием современных информационных технологий». г. Майкоп, 2017 г. Тема «Низкофоновый метод изотопных маркеров для измерения эффективности интеркаляции графита атомами калия».

4. Международный междисциплинарный симпозиум «Физика поверхностных явлений межфазных границ и фазовые переходы (PSP&PT)», г. Туапсе, 6–21 сентября 2017 г. Тема «Моделирование интеркаляции графита атомами металлов».

5. XXXI Международная конференция. «Уравнения состояния вещества», 1–6 марта 2016 г., Эльбрус, Кабардино-Балкария. Темы: «Influence of three body potentials on equations of state in the frame molecular dynamics», «Synthesis and thermal properties of pristine and hydrogenated carbon graphene-like materials».

6. XXX Международная конференция «Взаимодействие интенсивных потоков энергии с веществом», 1-6 марта 2015 г., Эльбрус, Кабардино-Балкария. Тема «Three body potential for EOS obtained in the frame of molecular dynamics method».

7. III Международная научно-практическая конференция «Прикладные аспекты геологии, геофизики и геоэкологии с использованием современных информационных технологий» Майкоп, 2015 г.

8. Международный междисциплинарный симпозиум «Физика поверхностных явлений межфазных границ и фазовые переходы (PSP&PT)», г. Туапсе, 16–21 сентября 2015 г.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ № 18-02-01042 а, № 16-29-01042 офи_м и Фонда содействия инновациям (грант № 0038507).

Личный вклад автора. Основные результаты диссертационной работы получены лично автором. Положения диссертационной работы опубликованы в соавторстве с научным руководителем. Постановка задач, выбор методик расчета осуществлялся совместно с научным руководителем. Автором лично проведены все молекулярно-динамические расчеты с использованием пакетов LAMMPS и HyperChem, а также самостоятельно разработаны программные коды для построения уравнения состояния инертных газов с учетом трехчастичных взаимодействий и нахождения распределения частиц по кластерам. Ахматовым З.А. проведен эксперимент по электрохимической интеркаляции графита атомами калия и совместно с сотрудниками БНО низкофоновые измерения содержания в интеркалированных образцах гамма-активного изотопа К-40. Диссертантом самостоятельно проведена обработка данных экспериментов по рамановскому рассеянию и идентификация графеноподобных структур, выращенных методом CVD.

Публикации. По теме диссертационной работы с участием автора опубликовано 12 научных работ, из которых 6 – статьи, опубликованные в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ.

Содержание работы. Во **введении** кратко описано современное состояние физики графена, в частности, методы идентификации графена и графеноподобных структур. Показана необходимость использования компьютерного моделирования для оптимизации метода получения графена и ГС, сформулирована цель работы, обоснованы новизна и практическая значимость полученных результатов.

Первая глава посвящена подробному обзору теоретических и экспериментальных работ по получению графена, интеркалированных соединений графита и их идентификации методом рамановской спектроскопии. Приведены основные алгоритмы и потенциалы взаимодействия, используемые при молекулярно-динамическом моделировании инертных газов и систем с ковалентной связью. Описаны различные термостаты, часто используемые в МД моделировании, отмечены их преимущества и недостатки.

Во второй главе рассмотрен метод получения уравнения состояния инертных газов и их смесей на основе использования теоремы о вириале силы. Для получения уравнения состояния использовалась программа для многопроцессорных МД вычислений LAMMPS (Large-scale Atomic Molecular Massively Parallel Simulator), а также оригинальная программа МД моделирования.

Классические уравнения движения имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{dx_i^k}{dt} &= v_i^k, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad k = 1, 2, 3 \\ \frac{dv_i^k}{dt} &= -\frac{1}{m_i} \frac{\partial}{\partial x_i^k} U(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N). \end{aligned} \quad (1)$$

Уравнение состояния получается усреднением по времени вириала силы

$$Pv = k_B T + \frac{1}{3N} \langle W(r_1, \dots, r_N) \rangle, \quad (2)$$

где P – давление, v – удельный объем, T – температура системы, N – число частиц в системе. Вириал силы записывается следующим образом

$$W(r_1, \dots, r_N) = - \sum_{i=1}^N r_i \nabla_i U(r_1, \dots, r_N). \quad (3)$$

Учет трехчастичных сил приводит к следующему выражению для давления

$$P = \frac{k_B T}{v} + \frac{1}{3Nv} \left(\sum_{(i,j)} r_{ij} \frac{\partial \Phi^{(2)}}{\partial r_{ij}} + \sum_{(i,j,k)} r_i \nabla_i \Phi_{ijk}^{(3)} \right) + \frac{2\pi}{3v^2} \int_{r_1}^{\infty} F_2(r) \frac{d\Phi^{(2)}}{dr} r^3 dr, \quad (4)$$

где $\Phi^{(2)}(r_{ij})$ – парный центральный потенциал, $r_{ij} = |r_i - r_j|$.

Энергия трехчастичного взаимодействия вычисляется на основе использования одного из шести алгебраически независимых инвариантов I_3 относительно группы преобразований $O(3) \times S_3$, составленных из радиус- векторов частиц [1]

$$I_3 = r_{ij}^2 r_{jk}^2 r_{kl}^2. \quad (5)$$

Потенциал трехчастичного взаимодействия типа Ван–дер–Ваальса был получен Аксилродом и Теллером. Он выражается через инвариант I_3 и косинусы углов между направлениями на атомы

$$\Phi_{ijk}^{(3)} = \frac{C}{I_3^{\frac{3}{2}}} \left(1 + \frac{3 (r_{ij} r_{kj}) (r_{ik} r_{jk}) (r_{ij} r_{ik})}{I_3} \right), \quad (6)$$

где $C = I_0 \alpha^3$, I_0 – потенциал ионизации изолированного атома, α – поляризуемость атома. Для случая газовых смесей коэффициент C пропорционален произведению поляризуемостей взаимодействующих атомов.

Результаты моделирования, как с учетом, так и без учета трехчастичного взаимодействия, аппроксимировались двухпараметрическим уравнением Ван-дер-Ваальса. Полученные параметры a и b , а также значения критической температуры и давления приведены в таблице 1. Там же приведены их экспериментальные значения [2].

Таблица 1 – Значения постоянных Ван–дер–Ваальса для ксенона с учетом трехчастичного потенциала

	$\sigma, \text{Å}$	$T_0 = \frac{\varepsilon}{k_B}, K$	a_{LJ}	b_{LJ}	T_c, K	$P_c, \text{атм}$
Парный потенциал	4,07	282	4,92	1,32	310	60,36
Трехчастичный потенциал	4,07	282	4,81	1,36	295,5	56,08
Эксперимент. данные [2]	3,89	282	5,06	1,46	289,86	58,57

Графики уравнения состояния ксенона в трехмерном случае с учетом трехчастичных взаимодействий показаны на рисунке 1.

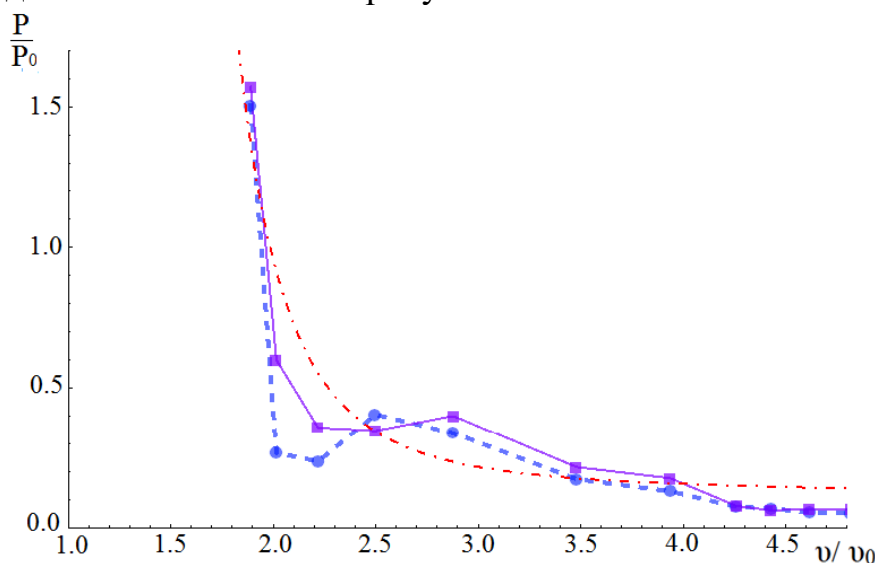


Рисунок 1 – Графики уравнения состояния ксенона при температуре $T/T_0 = 1,2$.

Пунктирная линия – центральные двухчастичные взаимодействия, сплошная линия – учет трехчастичных взаимодействий в приближении Аксилрода–Теллера, штрихпунктир – аппроксимация уравнением Ван–дер–Ваальса экспериментальных данных из [2]

Разница между двухчастичными и трехчастичными расчетами для критической температуры ксенона составила 14,5 К.

При учете только двухчастичных взаимодействий отличие расчетной критической температуры от эксперимента составляет 7 %, тогда как при учете трехчастичных взаимодействий она стала равной 2 %. Критическое давление ксенона с учетом трехчастичных взаимодействий на 7 % ниже, чем критическое давление для случая учета лишь парных взаимодействий.

При конденсации инертных газов атомы формируют кластеры, растущие как в результате захвата отдельных атомов, так и в результате слияния уже сформированных кластеров. Нами находилось распределение частиц по кластерам N_k , которые в свою очередь ранжировались (индекс k) по размерам. Для этого кластеры перенумеровывались в порядке убывания числа частиц в них. Самому большому кластеру соответствует $k = 1$, второму по величине $k = 2$ и т.д. Такой подход позволяет определить вклад крупных кластеров в процесс нуклеации и является альтернативным к широко используемому в теории аэрозолей распределению кластеров по числу частиц $W(N)$, их размерам r или логарифмам размеров. На рисунке 2 показано распределение $N_0 = 2353$ частиц по кластерам N_k при заданном параметре взаимодействия

$\eta = \frac{r_0}{a} = 1,355$, где r_0 – расстояние, при котором соседние частицы можно считать при-

надлежащими одному кластеру, $a = n^{1/3}$ – среднее расстояние между частицами, n – концентрация частиц. Серыми квадратами показано распределение частиц по кластерам при использовании потенциала Леннарда–Джонса ($r_0 = 2^{1/6} \sigma$, $T = 1,29 T_0$, $k_B T_0$ – глубина потенциальной ямы). Черные квадраты соответствуют свободному модельному распределению, когда взаимодействие между частицами выключено, а группировка частиц в один кластер проводится с тем же r_0 , что и в первом случае. Пунк-

тирная кривая – универсальное распределение, получаемое из свободного, в пределе увеличения числа прогонов.

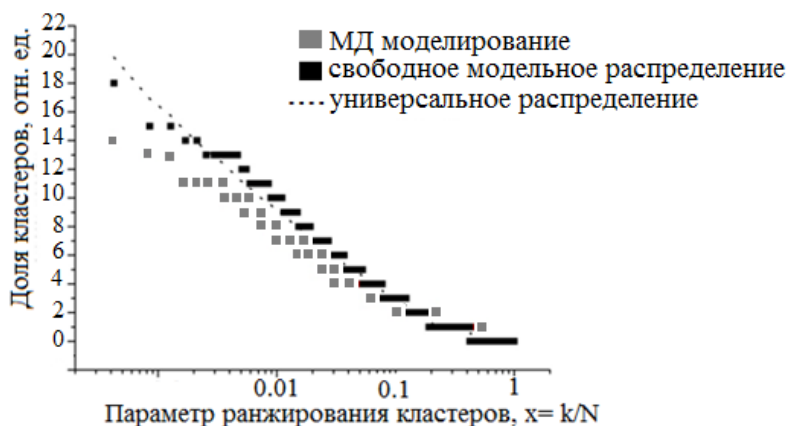


Рисунок 2 – Распределения частиц по кластерам N_k для аргона в системе с $N_0 = 2353$ и $\eta = 1,355$. Серые квадраты – расчёт методом МД; чёрные квадраты – модельное распределение, полученное с помощью одного прогона; пунктирная линия – модельное распределение, полученное по 50 прогонам.

При проведении молекулярно-динамического моделирования смеси инертных газов Kr и Xe при температуре, близкой к температуре конденсации, был обнаружен эффект их покомпонентного расслоения. На рисунке 3 показан результат эволюции системы за время $t = 50 t_0$. Где за единицу времени принимается величина

$$t_0 = \sqrt{\frac{M}{\varepsilon}} \sigma = 5,88 \cdot 10^{-12} \text{ C}.$$

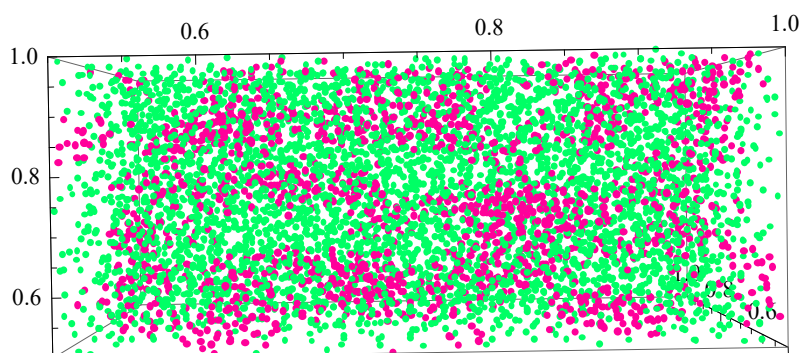


Рисунок 3 – Пространственная конфигурация атомов смеси Kr и Xe при температуре $\frac{T}{T_0} = 1,15$ и удельном объеме $\nu = 1$ спустя время $t = 50 t_0$.

Как видно из рисунка 3, спустя время $t = 50 t_0$ в конфигурации атомов Коб–Андерсеновской смеси наблюдается покомпонентное расслоение. Мольные концентрации компонент брались $c_A = 0,8$ для криптона и $c_B = 0,2$ для ксенона, что соответствует Коб–Андерсеновской смеси [3, 4]. Моделирование выполнялось при температуре $T = 1,15 T_0$, где T_0 соответствует глубине потенциальной ямы криптона. Уравнение состояния смеси Kr и Xe аппроксимировалось уравнением Ван–дер–Ваальса

$$P = \frac{k_B T}{\varepsilon(\nu - b)} - \frac{a}{\nu^2}, \quad (7)$$

где ε – глубина потенциальной ямы для потенциала Леннарда–Джонса.

Уравнение состояния Коб–Андерсеновской смеси криптона и ксенона показано на рисунке 4.

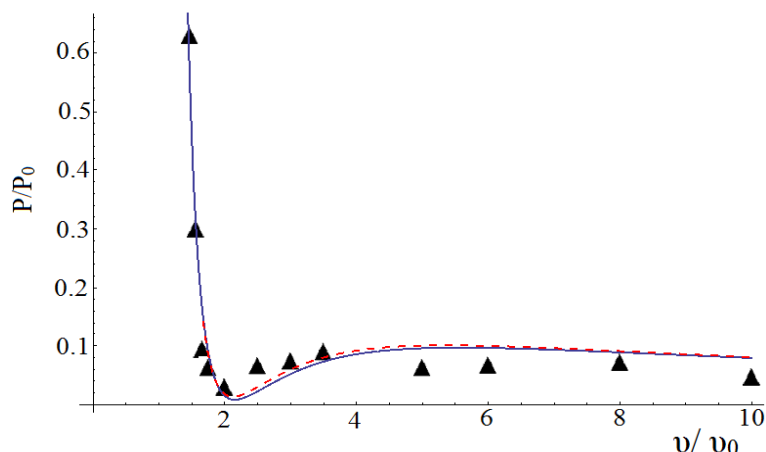


Рисунок 4 – Уравнение состояния смеси Kr и Xe с мольными концентрациями 0,8 и 0,2 для Kr и Xe, соответственно, при температуре $\frac{T}{T_0} = 1,15$. Треугольники со-

ответствуют моделированию с помощью программы LAMMPS. Пунктирная и сплошная линии соответствует Ван–дер–Ваальсовской аппроксимации

Ван–дер–Ваальсовская аппроксимация результатов моделирования дала для коэффициентов a и b , значения, приведенные в таблице 2.

Таблица 2 – Значения постоянных Ван–дер–Ваальса для Kr, Xe и их Коб–Андерсеновской смеси

Атомы	aLJ	bLJ	a	b	T_c, K
Kr–Kr	5,87	1,37	5,71	1,35	206,7
Xe–Xe	5,06	1,46	6,11	1,76	290,4
Kr–Xe	4,77	1,05	–	–	379,5

Третья глава посвящена динамическим свойствам ГС в рамках метода молекулярной динамики, а также изучению возможности идентификации этих структур по данным рамановского рассеяния.

На рисунке 5 показаны прямая и обратные решетки графена, где атомы первого и второго типа обозначены серыми и белыми кружками, соответственно. На каждую элементарную ячейку графена, ограниченную базисными векторами a_1 и a_2 , приходится два атома, характеризующиеся различными амплитудами смещений.

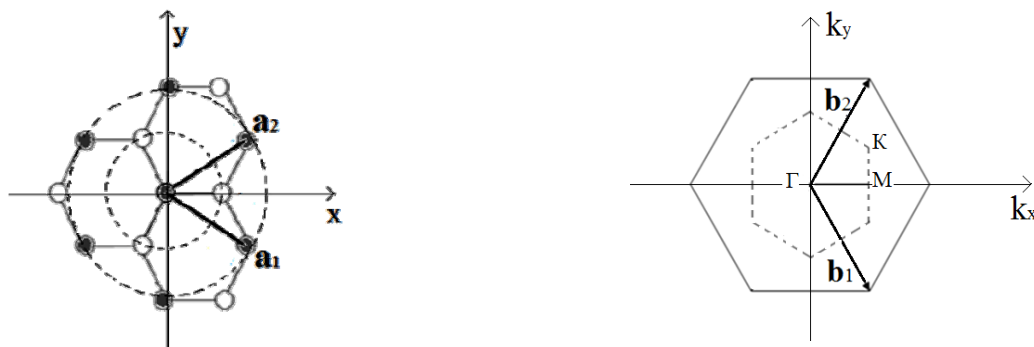


Рисунок 5 – Прямая – (а) и обратная – (б) решетки графена. a_1, a_2 и b_1, b_2 – базисные вектора прямой и обратной решетки, соответственно. Пунктиром выделена зона Брюллиэна.

Базисные вектора прямой решетки имеют вид

$$\mathbf{a}_1 = d \left(\frac{3}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \mathbf{a}_2 = d \left(\frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad (8)$$

где $d = 1,418 \text{ \AA}$ – расстояние между ближайшими атомами углерода в решетке графена.

Соответствующие базисные вектора обратной решетки \mathbf{b}_1 и \mathbf{b}_2 для которых выполняется соотношение $a_i b_j = 2\pi \delta_{ij}$ равны:

$$\mathbf{b}_1 = g_0 \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad \mathbf{b}_2 = g_0 \left(\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right), \quad (9)$$

где $g_0 = \frac{4\pi}{3d}$.

В главе рассмотрены две аналитические модели колебательной динамики графена в гармоническом приближении, учитывающие взаимодействия атомов, принадлежащих только первой координационной сфере, так и первым двум координационным сферам. Динамическая матрица для первой модели выражается через одну силовую постоянную f_1 характеризующую взаимодействие атома углерода с ближайшими тремя соседями (первая координационная сфера). Вторая модель [5] учитывает также взаимодействие с шестью атомами, находящимися на второй координационной сфере, которое выражается через вторую силовую постоянную $f_2 \ll f_1$. Для получения плотности фононных состояний и построения рамановских спектров, используются аналитические дисперсионные соотношения этих двух моделей. Для второй модели в случае поперечных колебаний связь между частотой фонона ω с его волновым вектором $\mathbf{k} = p_1 \mathbf{b}_1 + p_2 \mathbf{b}_2$ имеет вид

$$\omega(p_1, p_2) = \omega_0 \sqrt{3 - \delta b(p_1, p_2) \pm a(p_1, p_2)}, \quad (10)$$

где $\omega_0 = \sqrt{\frac{f_1}{m}}$, $\delta = 2 \frac{f_2}{f_1}$,

и введены функции

$$b(p_1, p_2) = \cos(2\pi p_1) + \cos(2\pi p_2) + \cos(2\pi (p_1 - p_2)), \quad (11)$$

$$a(p_1, p_2) = \sqrt{3 + 2 b(p_1, p_2)}. \quad (12)$$

В случае, если ограничиться взаимодействием атомов углерода между ближайшими тремя соседями (первая координационная сфера), то дисперсионная формула (10) сводится к формуле модели гексагональной сетки, в узлах которой находятся атомы [6]

$$\omega = \omega_0 \sqrt{3 \mp a(p_1, p_2)}. \quad (13)$$

Для случая взаимодействия атомов углерода внутри первых двух координационных сфер дисперсионные кривые для акустических и оптических ветвей показаны на рисунке 6 сплошной линией. Для сравнения, на том же рисунке пунктирной линией показаны дисперсионные кривые при учете взаимодействия лишь в первой координационной сфере.

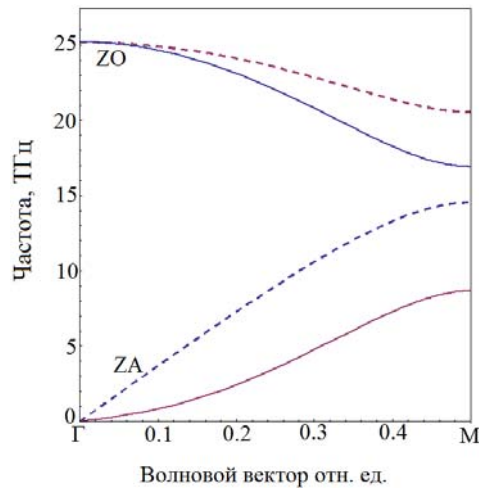


Рисунок 6 – Дисперсионные кривые для поперечных колебаний атомов графена в рамках аналитических моделей, предложенных в работах [5] – сплошные кривые и [6] – пунктирные кривые

Подбор двух силовых постоянных f_1 и f_2 для модели [5] осуществлялся нами на основе сравнения аналитических дисперсионных кривых с экспериментально полученными в работе [7] дисперсионными кривыми. На рисунке 7 представлен результат этого эксперимента (треугольники), а также дисперсионные кривые, построенные по формуле (10) с силовыми постоянными из работы [5] $f_1 = 1,176 \times 10^5 \text{ см}^{-2}$ и $f_2 = 0,190 \times 10^5 \text{ см}^{-2}$ (сплошные линии).

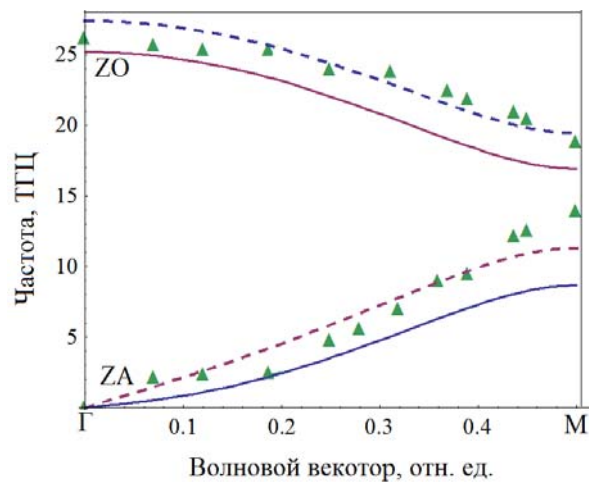


Рисунок 7 – Дисперсионные кривые для поперечных колебаний атомов графена в рамках аналитической модели, предложенной в работе [5]. Сплошные кривые – значения силовых постоянных из работы [5], пунктирные – модифицированные значения параметров силовых постоянных, треугольниками показаны результаты эксперимента [7]

Нами предлагается использовать значения силовых постоянных $f_1 = -1,129 \times 10^5 \text{ см}^{-2}$ и $f_2 = 0,147 \times 10^5 \text{ см}^{-2}$. Эти постоянные получаются аппроксимацией экспериментальных данных методом наименьших квадратов. Дисперсионные кривые для этих параметров показаны на рисунке 7 пунктирными линиями. Плотность фононных состояний, построенная на основе соотношения (10) для случая взаимодействия атомов углерода внутри первых двух координационных сфер, показана на рисунке 8 сплошной линией. Пунктирной линией на том же рисунке показана плотность фононных состояний при учете взаимодействия между ближайшими соседями (первая координационная сфера).

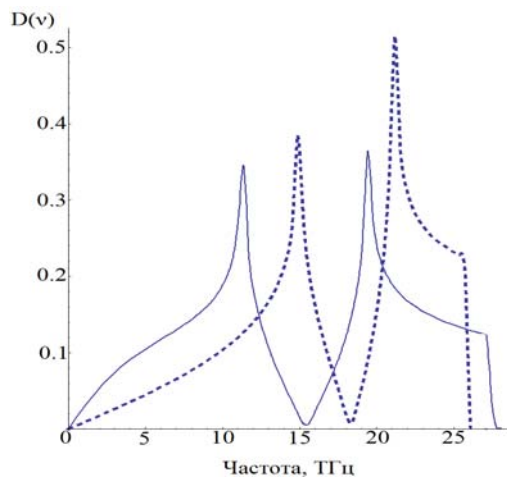


Рисунок 8 – Плотность фоновых состояний для поперечных колебаний в решетке графена в случае учета взаимодействия атомов углерода, лежащих внутри первых двух координационных сфер – сплошная кривая, и случай учета взаимодействия только с ближайшими соседями – пунктирная кривая

В работе также с помощью программы для квантово-химических расчетов HyperChem получены плотности фоновых состояний для однослойного, двухслойного графена и различных графеноподобных структур. На рисунке 9 показана плотность фоновых состояний для однослойного графена.

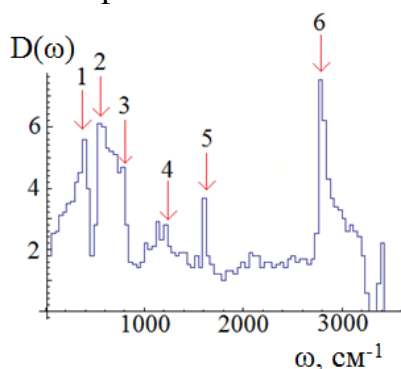


Рисунок 9 – Плотность фоновых состояний для графенового кластера, состоящего из 724 атомов углерода. Стрелками отмечены максимумы: 1 – 372 см^{-1} , 2 – 529 см^{-1} , 3 – 764 см^{-1} , 4 – 1195 см^{-1} , 5 – 1587 см^{-1} (G), 6 – 2762 см^{-1} (2D)

Плотность фоновых состояний для двухслойного графена представлена на рисунке 10.

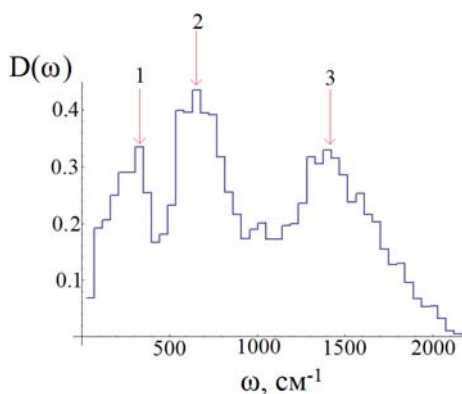


Рисунок 10 – Плотность фоновых состояний для двухслойного графена. Пикам соответствуют частоты: 1 – 320 см^{-1} , 2 – 610 см^{-1} , 3 – 1450 см^{-1}

Пики $\omega = 320 \text{ см}^{-1}$, $\omega = 610 \text{ см}^{-1}$ и $\omega = 1450 \text{ см}^{-1}$ соответствуют характерным частотам в однослойном графене. Максимуму в плотности состояний двухслойного графена, приходящемуся на частоту $\omega = 1450 \text{ см}^{-1}$, соответствует максимум $\omega = 1587 \text{ см}^{-1}$ для монослойного графена.

Для определения по результатам молекулярно-динамического моделирования матрицы силовых постоянных, построения динамической матрицы и нахождения дисперсионных соотношений нами был использован подход, предложенный в работе [8]. На рисунке 11 показаны дисперсионные кривые, полученные с помощью программы LAMMPS с использованием различных многочастичных потенциалов.

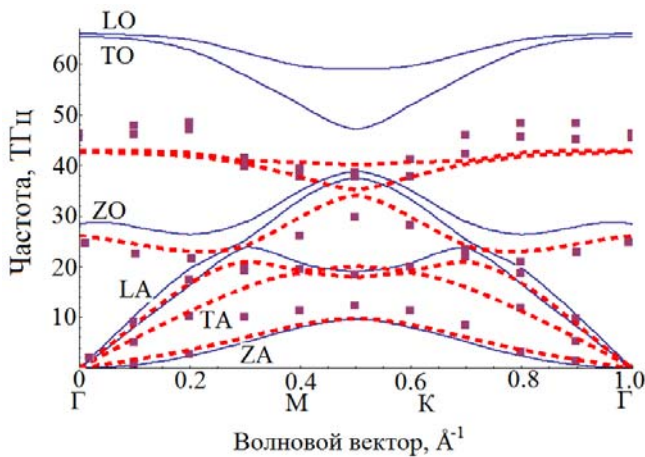


Рисунок 11 – Дисперсионные кривые для графена. Линиям соответствуют: сплошная – потенциал Терсофа, пунктирная – LCBOP. Квадраты – экспериментальные данные

Из рисунка видно, что наиболее точное совпадение расчетных дисперсионных кривых с экспериментальными данными получается при использовании многочастичного потенциала LCBOP, тогда как использование потенциала Терсофа дает завышенные значения для частот оптических мод во всей зоне Бриллюэна.

Программа LAMMPS содержит модули, позволяющие находить все упругие постоянные. В таблице 3 приводятся упругие постоянные для графена, полученные с помощью программы LAMMPS при использовании потенциала LCBOP. Там же приведены экспериментальные значения упругих постоянных [9].

Таблица 3 – Упругие константы для графена

Упругие константы, ГПа	C_{11}	C_{33}	C_{12}
Моделирование	987,2 ₇	28,8 ₉	219,0 ₅
Эксперимент	1060 (16)	36,5 (10)	180 (20)

Упругие константы, ГПа	C_{13}	C_{44}	C_{66}
Моделирование	0,03 ₁	0,07 ₈	38 ₄
Эксперимент	0 (3)	4,0 (4)	440 (20)

Упругие константы позволяют найти параметры Грюнайзена по формуле, предложенной в работе [10]

$$\Gamma = \frac{V}{C_p} (C_{33} + 2 C_{13}) \alpha, \quad (14)$$

где C_{ik} – упругие постоянные, V – объем, C_p – удельная теплоёмкость при постоянном давлении и α – коэффициент линейного расширения. Соотношение (14) использовалось для нахождения параметров Грюнайзена графита в работе [11]. Графики зависимости параметра Грюнайзена от температуры для графена и графита показаны на рисунке 12.

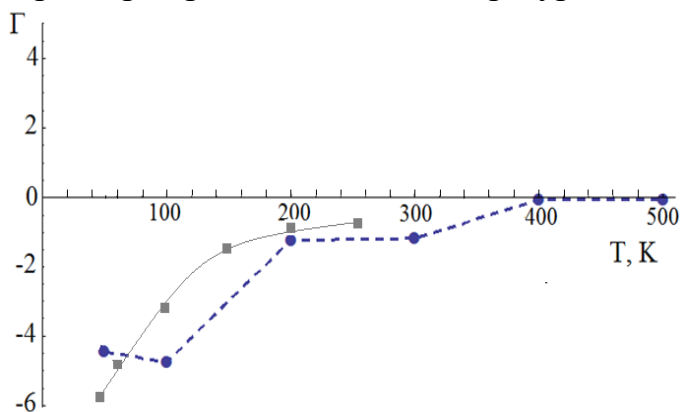


Рисунок 12 – Расчетные значения параметров Грюнайзена для графена и графита как функции температуры. Кружки – графен, программа LAMMPS с потенциалом LCBOP, квадраты – графит, результат работы [11]

При моделировании нами было выявлено, что, наряду с малыми колебаниями отдельных атомов, имеют место изгибные колебания всей плоскости с амплитудами, на один порядок и более превышающими амплитуду тепловых колебаний атомов в трехмерных кристаллах. Пример МД моделирования таких колебаний показан на рисунке 13.

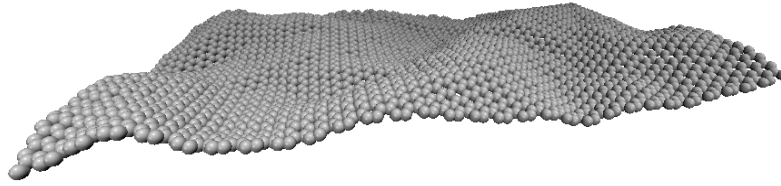


Рисунок 13 – Плоскость графена в момент времени $t = 10 t_0$

Изгибные колебания с большими амплитудами были выявлены при использовании потенциала Терсофа. Раскачка изгибных колебаний плоскости графена в случае использования других многочастичных потенциалов, таких как REBO и LСВОР, отсутствуют. Величина амплитуды колебаний зависит от размера образца и достигает значений 10^{-2} длины образца.

Для определения спектра характерных частот поперечных колебаний атомов углерода в случае, когда имеют место изгибные колебания плоскости графена, мы воспользовались дискретным преобразованием Фурье для временной зависимости поперечной координаты $z(t)$

$$z_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N-1} F_n \exp\left[-i \frac{2\pi}{N} n k\right], \tag{15}$$

где $z_k = z_k(t_k)$, $t_k = k \Delta t$, шаг по времени $\Delta t = \frac{T}{N}$, T – весь рассматриваемый временной интервал. Амплитуды F_n в разложении (15) находятся по формуле

$$F_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} z_k \exp\left[i \frac{2\pi}{N} k n\right]. \tag{16}$$

Номерам n в разложениях (15) и (16) соответствуют частоты $\omega_n = \frac{2\pi n}{N\Delta t}$.

На рисунке 14 показаны модули Фурье компонент, соответствующие доминирующим обертонам изгибных колебаний

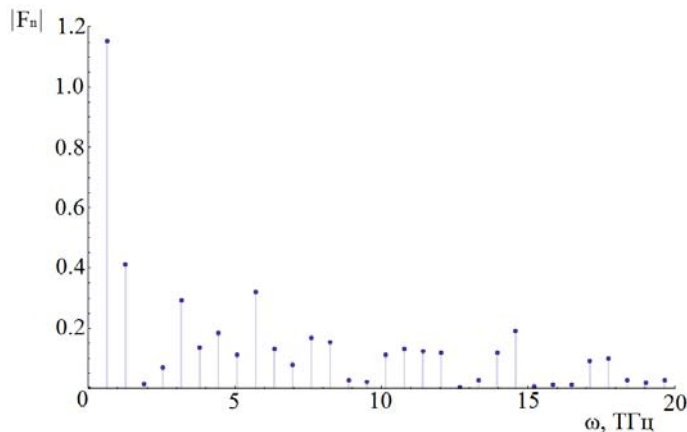


Рисунок 14 – Модули Фурье компонент основных обертонов изгибных колебаний плоскости графена

На рисунке 15 представлено сравнение характерных частот изгибных колебаний, полученных нами, со спектром частот графеновой мембраны, найденным в работе [12].

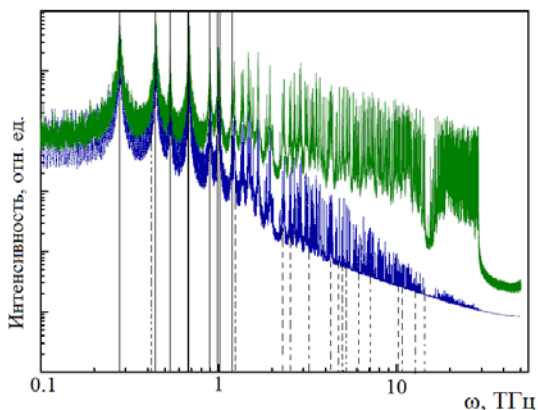


Рисунок 15 – Сравнение положений максимумов в спектре колебаний мембраны из работы [12], с характерными частотами (пунктирные вертикальные линии) на рисунке 15

Далее в главе проводится интерпретация рамановских спектров графеноподобных структур, полученных методом химического осаждения из газовой фазы (CVD). На рисунке 16 показаны результаты экспериментов по рамановскому рассеянию лазерного излучения с длиной волны 514 нм на различных графеноподобных углеродных структурах.

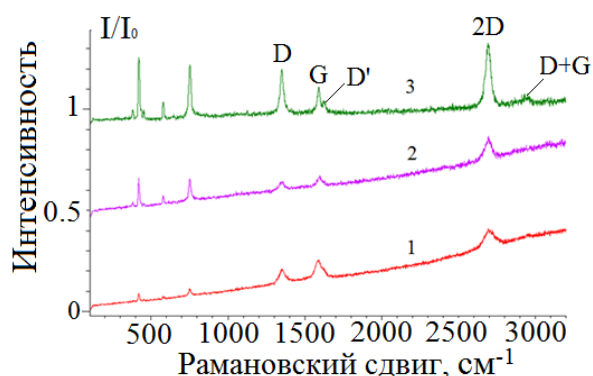


Рисунок 16 – Рамановские спектры образцов графена, полученных методом химического осаждения из газовой фазы

Кривые 1 и 2, показанные на рисунке 16, соответствуют многослойным графеновым структурам на сапфировых подложках различного качества, кривая 3 соответствует графену с краевыми дефектами, о чем свидетельствуют выраженные пики D – 1350 см^{-1} , D' – 1610 см^{-1} и комбинированный пик D + G – 2950 см^{-1} .

Рамановские спектры образцов, полученных при относительно быстром охлаждении, показаны на рисунке 17.

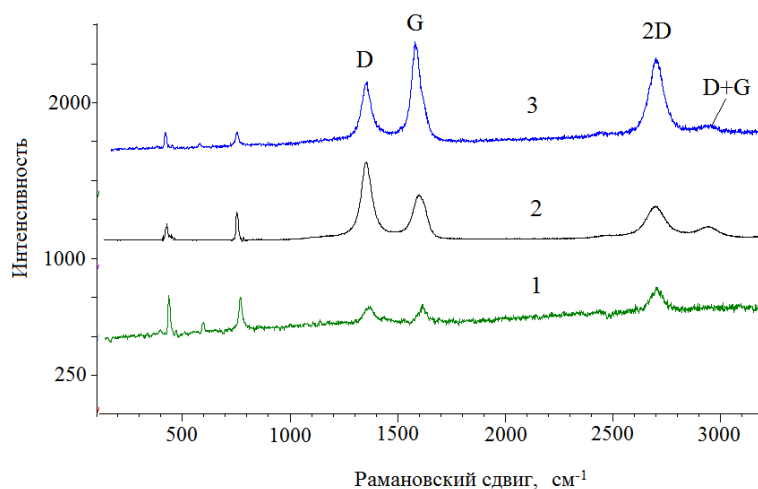


Рисунок 17 – Рамановские спектры графеноподобных структур, полученных методом химического осаждения из газовой фазы, при относительно быстром охлаждении реактора

Кривая 1 на рисунке 17 соответствует спектру многослойного графена, кривые 2 и 3 показывают, что идет образование графитовых образцов, о чем свидетельствует увеличение G-пика относительно пика-2D. Также мы видим, что при быстром охлаждении получаемые образцы имеют большое количество дефектов, об этом говорит присутствие в спектрах комбинационного рассеяния пиков D и D + G. Для случая высокоориентированного пиролитического графита (ВОПГ) в рамановском спектре присутствуют только два выраженных пика: G – 1587 см⁻¹ и D – 2760 см⁻¹.

Для интерпретации спектров рамановского рассеяния несовершенными графеноподобными структурами необходим учет амплитуд перехода четвертого порядка теории возмущения из-за двойного резонанса [13, 14]. Запишем амплитуду, дающую вклад в D-полосу, соответствующую двойному резонансу с двумя междолинными перебросами квазиимпульса электрона между окрестностями точек K и K' обратного пространства. Электрон переходит из K в K' при рассеянии на дефекте и возвращается в исходную точку K пространства с излучением фонона с частотой $\Omega_{qr} = 1350 \text{ см}^{-1}$ (рисунок 18).

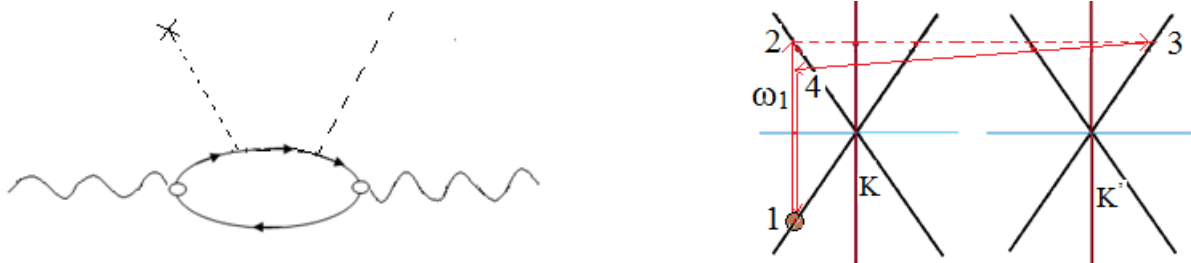


Рисунок 18 – Диаграмма, дающая вклад в D-пик при двойном резонансном рамановском рассеянии. Справа – соответствующая схема переходов в k-пространстве

Запишем амплитуду рамановского рассеяния фотона графеном, показанному на рисунке 18 и соответствующую двойному резонансному процессу с рассеянием электрона на дефекте и излучением фонона (в единицах $\hbar = 1$)

$$M_{ee}(\omega_2, \Omega_{qr}, r | \omega_1, 0) = \sum_p \frac{\langle p | \pi | H_{eR} | p \pi^* \rangle \langle p \pi^* | H_{e-l} | p + q, \pi^* \rangle \langle p + q, \pi^* | H_{ed} | p \pi^* \rangle \langle p \pi^* | H_{eR} | p \pi \rangle}{[\omega_1 - \Omega_{qr} - \varepsilon_p^{\pi^*} + \varepsilon_p^{\pi} + i \frac{\Gamma}{2}] [\omega_1 - \varepsilon_{p+q}^{\pi^*} + \varepsilon_p^{\pi} + i \frac{\Gamma}{2}]}$$

где ω_1 - частота падающего фотона, суммирование идет по квазиимпульсам, лежащим в первой зоне Бриллюэна. В результате поглощения фотона (точка 1) электрон переходит из зоны π в зону проводимости π^* (точка 2), затем, упруго рассеиваясь на краевом дефекте, испытывает междолинный переход (точка 3). После этого электрон излучая фонон с частотой Ω_{qr} , возвращается в исходную зону, оказываясь над своей вакансией (точка 4) и аннигилируя с ней, излучает фотон с частотой $\omega_2 = \omega_1 - \Omega_{qr}$.

В четвертой главе реализован метод определения эффективности интеркаляции графита атомами калия в низкофоновых условиях. Приведен эксперимент по электрохимической интеркаляции графита калием. Методом молекулярной динамики изучается процесс интеркаляции атомами металлов высокоориентированного пиролитического графита, и последующая релаксация решетки.

Интеркалированный атомами металлов графит представляет собой слоистую структуру, обладающую рядом уникальных свойств. Так, при интеркаляции высокоори-

ентированного пиролитического графита кальцием возникает сверхпроводимость вдоль плоскостей, параллельных базальной плоскости. Интеркаляция графита атомами калия и железа приводит к существенному увеличению межплоскостного расстояния вплоть до отщепления от графита внешних монослоев с сворачиванием их в нанотрубки.

В работе методом молекулярной динамики с помощью программы для параллельных вычислений LAMMPS рассматривается интеркаляция высокоориентированного графита через его края.

Взаимодействие между атомами углерода C–C описывалось многочастичным потенциалом Терсофа. Для металлов с гранецентрированной решеткой использован потенциал погруженного атома EAM

$$E_{\text{tot}} = \sum_i F_i(\rho_{h,i}) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(R_{ij}), \quad (18)$$

$$\rho_{h,i} = \sum_{j \neq i} \rho_j^\alpha(R_{ij}). \quad (19)$$

где R_{ij} – расстояние между i -м и j -м атомами, ϕ_{ij} – функция парного потенциала, ρ^α – вклад в плотность заряда электронов от j -го атома в месте расположения i -го атома, F – функция «погружения» по величине равная энергии, необходимой для помещения i -го атома типа α в электронное облако.

Взаимодействие между атомами углерода и калия описывалось потенциалом Леннарда-Джонса. Интеркалирование имеет место при табличных значениях параметров $\sigma_{KC} = 3,47 \text{ \AA}$ и $\epsilon_{KC} = 3,02 \text{ мэВ}$. МД моделирование показывает также, что при проникновении атомов калия в межплоскостные промежутки графита происходит увеличение межплоскостного расстояния вплоть до отслоения внешней плоскости графита. Так, для структуры C_8K межплоскостное расстояние увеличилось с 3.34 \AA до 5.72 \AA .

Увеличение межплоскостного расстояния двухслойной графеноподобной структуры с sp^2 гибридизованными σ – связями между слоями при его интеркаляции атомами калия, полученное с помощью программы HyperChem, показано на рисунке 19.

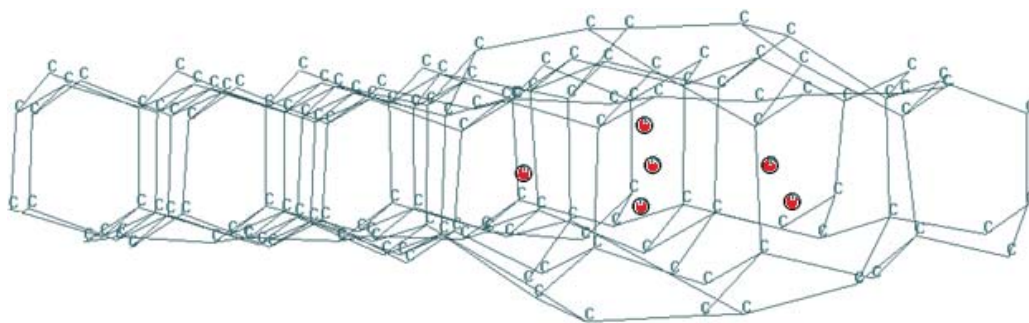


Рисунок 19 – Увеличение межплоскостного расстояния двухслойной графеноподобной структуры, интеркалированной атомами калия. Атомы калия обозначены красными кружками

Интеркаляция образца из рекристаллизованного графита производилась электрохимическим способом в насыщенном водном растворе соли KCl [15]. При этом графитовая пластина использовалась в качестве катода, адсорбирующего ионы K^+ , образуемые при диссоциации KCl. Продукты реакций удалялись с поверхности графитовой пластины промывкой водой. Для выяснения эффективности интеркаляции

рекристаллизованного графита атомами калия нами был разработан низкофонный вариант метода изотопных маркеров – «меченых атомов». В методе использовано то обстоятельство, что природный изотопный состав калия содержит 0,012 % долгоживущего гамма активного изотопа К-40 с периодом полураспада $1,28 \times 10^9$ лет. Задачей являлось определение количества атомов интеркалята в графите на основе измерения его гамма активности и выяснение точности метода. Сложность эксперимента заключалась в ультранизкой гамма активности интеркалированного образца, которая составляла порядка одного распада в час. Поэтому для проведения измерений гамма активности интеркалированных образцов графита использовался низкофонный спектрометр на основе особо чистого германия марки 4HPGe. Спектрометр расположен в подземной низкофоновой лаборатории НИКА Баксанской нейтринной обсерватории в тоннеле под горой Андырчи. Радиоактивный фон, обусловленный космическими лучами в этой лаборатории снижен в 2000 раз, что соответствует глубине 660 метров водного эквивалента.

Экспонирование интеркалированного калием графитового образца проводилось в течение 384 часов. На рисунке 20 приведен экспериментальный гамма спектр графита, интеркалированного атомами калия.

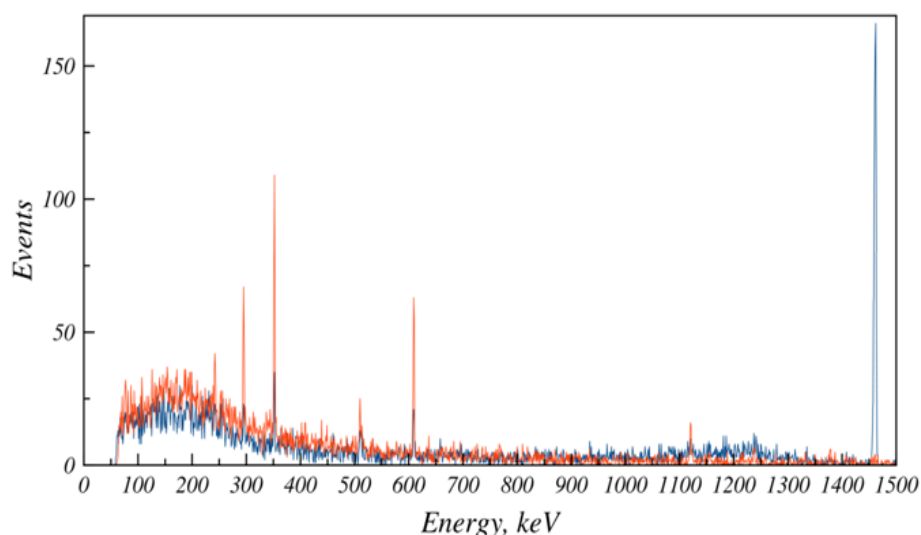


Рисунок 20 – Гамма спектр графитового образца, интеркалированного атомами калия с природным содержанием изотопа К-40, полученный с помощью германиевого полупроводникового детектора в низкофоновой камере НИКА за 384 часа экспозиции – синяя кривая, красная кривая – фон ППД за 990 часов

Число зарегистрированных распадов К-40 составило $N_1 = 768$ событий. Это соответствует $m = 0.17$ мг калия, проинтеркалировавшего в графитовую пластину массой $M = 23$ г. Яркий максимум при энергии 1.46 МэВ соответствует гамма квантам, появляющимся при распаде ядра К-40 в результате электронного захвата (10.72 %) с образованием дочернего ядра аргона Ar-40. На том же рисунке красной линией показан фон полупроводникового детектора, набранный за 990 часов. Выраженные пики при энергиях ниже 700 кэВ соответствуют гамма квантам дочерних продуктов распада радона Rn-222.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Разработана методика получения уравнения состояния инертных газов с учетом трехчастичных взаимодействий с помощью вириала силы. Показано, что для тяжелых инертных газов учет трехчастичных поляризационных взаимодействий вносит заметный вклад в уравнение состояния и значения критических параметров. Так, для ксенона учет трехчастичных взаимодействий приводит к изменению критической температуры и давления на 5 %.

2. Показано, что в начале процесса конденсации распределение частиц по кластерам в зависимости от параметра ранжирования кластеров носит универсальный характер.

3. Для Коб–Андерсеновской смеси криптона с ксеноном построено уравнение состояния Ван–дер–Ваальсовского типа и выявлен эффект покомпонентного расщепления вблизи критической точки конденсации.

4. На базе использования многочастичных потенциалов построены дисперсионные кривые, плотности фононных состояний и температурная зависимость среднеквадратичных смещений атомов в графеноподобных структурах.

5. Обнаружено, что при моделировании с использованием многочастичного потенциала типа Терсофа возможно появление изгибных колебаний плоскости графена мембранного типа с амплитудами, достигающими 10^{-2} длины образца.

6. Проведена идентификация графеноподобных структур, полученных методом химического осаждения из газовой фазы на поверхности сапфира, на основе сравнения МД расчетов и данных по рамановскому рассеянию.

7. Построена молекулярно-динамическая модель интеркаляции графита атомами металлов и релаксации решетки интеркалированного графита. Получено, что в интеркалированном графите со структурой C_8K межплоскостное расстояние увеличивается с 3.34 Å до 5.72 Å.

8. Предложен и реализован новый метод определения эффективности интеркаляции ГС соединениями калия, основанный на низкофоновых измерениях гамма-активности изотопа К-40. Показано, что точность метода может быть доведена до $10^{-8} - 10^{-9}$ г/г, при использовании калия, обогащенного этим изотопом.

ЦИТИРУЕМАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Осипенко, И.А. Многоатомные взаимодействия в теории модулей упругости высокого порядка: общая теория / И.А. Осипенко, О.В. Кукин, А.Ю. Гуфан // Физика твердого тела. – 2013. – Т. 55. – С. 2289–2296.

2. Физические величины. Справочник. Под ред. Григорьева И.С. и Мейлихова Е.З. Москва, Энергоатомиздат, – 1991 г. – 1232 с.

3. Kob, W. Scaling behavior in the β -relaxation regime of a super cooled Lennard-Jones mixture / W. Kob, H.C. Andersen // Physical Review Letters. – 1994. – V. 73. – P. 1376–1379.

4. Akhmatov, Z. A. Virial based equations of state with account of three-body interaction for noble gases and their mixtures / Akhmatov Z. A. Khokonov A. Kh., Khokonov M. Kh. // Journal of Phys. C. – 2016. – V.774. – 012038.

5. Falkovsky, L. A. Phonon dispersion in graphene / L. A. Falkovsky // Journal of Experimental and Theoretical Physics. – 2007. – V. 105. – № 2. – P. 397–403.

6. Хоконов, А. Х. Аналитическая модель поперечных колебаний графена / Хоконов, А. Х. // Известия РАН. Серия физическая. – 2014. – Т. 78. – № 8. – С. 991–994.
7. Wirtz L. The phonon dispersion of graphite revisited / Wirtz L., Rubio A. // Solid State Communications. – 2004. – V. 131. – № 3. – P. 141–152.
8. Kong, L. T. Phonon dispersion measured directly from molecular dynamics simulations / L.T. Kong // Computer Physics Communications. – 2011. – V. 182. – P. 2201–2207.
9. Michel, K. H. Theory of the elastic constants of graphite and graphene / K. H. Michel, B. Verberck // Phys. Stat. Sol. (B). – 2008. – V.10. – P. 2177–2180.
10. Gauster, W. B. Elastic constants and Grüneisen parameters of pyrolytic graphite / W. B. Gauster // Philosophical Magazine. – 2006. – P. 687–700.
11. Абдуллаев, Н.А. Параметры Грюнайзена в слоистых структурах / Н.А. Абдуллаев // Физика твердого тела. – 2001. – Т.43. – В. 4. – P. 697–700.
12. Rumeng, L. Thermal vibration of a single-layered graphene with initial stress predicted by semiquantum molecular dynamics / Rumeng, L. Lifeng, W., Jingnong J. // Mater. Res. Express. – 2016. – V. 3. – P. 1–10.
13. Venezuela, P. Theory of double-resonant Raman spectra in graphene: Intensity and line shape of defect-induced and two-phonon bands / P. Venezuela, M. Lazzeri, F. Mauri // Phys. Rev. B. – 2011. – V. 84. – P. 1–25.
14. Желтиков, А.М. Комбинационное рассеяние света в фемто- и аттосекундной физике / А.М. Желтиков // УФН. – 2011. – Т. 181. – № 1. – С. 33–58.
15. Akhmatov, Z. A. Low-background method of isotope markers for measuring the efficiency of intercalation of graphite by potassium atoms / Akhmatov, Z. A., Gangapshev, A. M., Romanenko, V. S., Khokonov, A. Kh., Kuzminov, V. V. // Phys. of Part. and Nucl. – 2018. – V.49. – No.4. – P. 787–792.

СПИСОК РАБОТ АВТОРА, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. **Akhmatov, Z. A.** Low-background method of isotope markers for measuring the efficiency of intercalation of graphite by potassium atoms / Akhmatov, Z. A., Gangapshev, A. M., Romanenko, V. S., Khokonov, A. Kh., Kuzminov, V. V. // Phys. of Part. and Nucl. – 2018. – V.49. – No.4. – P. 787–792.
2. **Akhmatov, Z. A.** Results of searching for solar hadronic axions emitted in the M1 transition in ^{83}Kr nuclei / Z. A. Akhmatov, Yu. M. Gavriluk, A. M. Gangapshev, A. V. Derbin // Phys. of Part. and Nucl. – 2018. – V. 49. – No. 4. – P. 599–601.
3. **Akhmatov Z. A.** Virial based equations of state with account of three-body interaction for noble gases and their mixtures / Akhmatov Z. A., Khokonov A. Kh., Khokonov M. Kh. // Journal of Phys. C. – 2016. – V. 774. 012038.
4. **Akhmatov Z. A.** Equations of state of noble gases and their mixtures with allowance for three-body interaction in molecular dynamics / Akhmatov Z. A., Khokonov A. Kh., Khokonov M. Kh. // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2016. – V. 80. – P.1358–1360.
- Ахматов З. А.** Уравнение состояния инертных газов и их смесей с учетом трехчастичных взаимодействий в рамках метода молекулярной динамики / Ахматов З. А., Хоконов А. Х., Хоконов М. Х. // Известия РАН. Серия Физическая. – 2016. – Т.80. – № 11. – С.1533–1535.

5. **Akhmatov Z. A.** Vibrational dynamics of pristine and the hydrogenated graphene surface / Akhmatov Z. A., Khokonov A. Kh., Tarala V. A. // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2016. – V. 80. – P. 1341–1343.

Ахматов З.А. Колебательная динамика чистой и гидрогенизированной поверхности графена / Ахматов З.А., Хоконов А.Х., Тарала В.А. // Известия РАН. Серия физическая. – 2016. – Т. 80. – № 11. – С. 1516–1518.

6. **Ахматов З.А.** Синтез новых материалов для наноэлектроники на основе графеноподобных структур и его моделирование на высокопроизводительных компьютерах / Ахматов З.А., Хоконов А.Х., Тарала В.А. // Перспективные инновационные проекты молодых ученых. Материалы VII Всероссийской конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. – Нальчик, 2017. – С. 18–21.

7. **Ахматов З.А.** Моделирование интеркаляции графита атомами металлов / Ахматов З.А., Хоконов А.Х. // Труды международного междисциплинарного симпозиума «Физика поверхностных явлений межфазных границ и фазовые переходы (PSP&PT)». – Туапсе, 2017. – С. 162.

8. **Ахматов З.А.** Изучение адсорбции атомов водорода и металлов на поверхности графена методами молекулярной динамики и рамановской спектроскопии / Ахматов З.А., Хоконов А.Х., Тарала В.А. // Актуальные проблемы современного материаловедения: коллективная монография. – Комплексный Научно-Исследовательский Институт РАН им. Х.И. Ибрагимова – Грозный: 2015. – 212 С.

9. **Akhmatov Z.A.** Simulation of hydrogen storage in graphite-potassium intercalation compounds / Akhmatov Z.A., Khokonov A.Kh., Kumukova F.I., Kirzhinova R.A. // Материалы IV Международной научно-практической конференции «Прикладные аспекты геологии, геофизики и геоэкологии с использованием современных информационных технологий». – г. Майкоп. – 2017. – С.6-10.

10. **Ахматов З.А.** Низкофоновый метод изотопных маркеров для измерения эффективности интеркаляции графита атомами калия / Ахматов З.А., Гангапшев А.М., Романенко В.С., Керевфев К.А., Хоконов А.Х., Кузьминов В.В., Эфендиев К.Т. // Материалы IV Международной научно-практической конференции «Прикладные аспекты геологии, геофизики и геоэкологии с использованием современных информационных технологий». – г. Майкоп. – 2017. – С.79-82.

11. **Ахматов З.А.** Получение уравнения состояния инертных газов и их смеси с учетом трехчастичных взаимодействий методом молекулярной динамики / Ахматов З.А., Хоконов А.Х., Хоконов М.Х. // Материалы III Международной научно-практической конференции «Прикладные аспекты геологии, геофизики и геоэкологии с использованием современных информационных технологий». – г. Майкоп. – 2015. – С. 23-27.

12. **Akhmatov Z.A.** Equation of state inert gases and mixtures there of with account three-particle interaction within the molecular dynamics method / Akhmatov Z.A., Khokonov A.Kh., Khokonov M.Kh. // Труды V международного междисциплинарного симпозиума «Физика поверхностных явлений, межфазных границ и фазовые переходы». – Нальчик - Ростов-на-Дону. – 2015. – Т.1. – В.5. – С. 303-309.

В печать 01.10.2018. Формат 60x84/16.
Печать цифровая. Бумага офсетная. 1.00 п.л.
Тираж 100 экз. Заказ № 108.

Отпечатан ИП «Binding2016»
360004, КБР, г. Нальчик, ул. Тургенева, 68