

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. проректора по научной и  
исследовательской деятельности  
доктор химических наук

А.В. Метелица

« 11 » 2018 г.



### ОТЗЫВ

ведущей организации федерального государственного автономного  
образовательного учреждения высшего образования «Южный федеральный  
университет» о диссертационной работе Ахматова Зейтуна Ануаровича  
«Влияние многочастичных взаимодействий на термодинамические свойства  
инертных газов и колебательную динамику графеноподобных структур»,  
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических  
наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния  
(физико-математические науки)

Актуальность темы диссертационной работы

Диссертационная работа Ахматова З.А. посвящена исследованию влияния  
многочастичных взаимодействий на уравнение состояния инертных газов и  
динамические свойства графеноподобных структур и интеркалированного  
атомами калия графита. Уравнение состояния плотных газов, жидких и  
деформируемых твердых тел позволяет замкнуть соответствующую систему  
дифференциальных уравнений механики сплошной среды и решить задачу о  
поведении такой системы (тепломассоперенос, распространение объемных и  
поверхностных волн и др.). Метод молекулярной динамики позволяет получать  
уравнения состояния напрямую вычисляя перенос импульса через заданную  
поверхность, однако такой подход малоэффективен и неприменим для газовых  
систем, находящихся вблизи точки конденсации, жидкости и кристаллических  
твердых тел. Поэтому актуальным является развитие подходов, основанных на

вычислении вириала силы с учетом возможного многочастичного характера взаимодействия.

В последнее время углеродные материалы и наноструктуры на их основе находят все более широкое применение в наноэлектронике и микросенсорике. Однако, многие важные задачи, связанные с их применением в этой области, не удается решать из-за большого количества структурных дефектов при получении графеноподобных структур (ГС). Успешное решение задачи получения совершенных ГС структур предъявляет высокие требования к пониманию структурных и динамических свойств ГС. Рамановская спектроскопия зарекомендовала себя как один из наиболее перспективных методов идентификации графеноподобных материалов, она позволяет определять наличие краевых дефектов и количество слоев в многослойном графене. Поэтому тема диссертационной работы Зейтуна Ануаровича Ахматова является актуальной.

#### Общая характеристика диссертации

Диссертационная работа состоит из введения, 4 глав, выводов и списка литературы, включающего 133 наименования. Материал изложен на 144 страницах и проиллюстрирован 73 рисунками и 12 таблицами. После каждой главы приводятся выводы.

**Во введении** к диссертации обосновывается ее актуальность, сформулирована цель работы, научные положения, выносимые на защиту, отмечается новизна и практическая значимость темы диссертации.

**Первая глава** посвящена обзору современного состояния физики графена. Обсуждаются различные методы получения ГС и интеркалированных соединений графита (ИСГ). Рассмотрено применение спектроскопии комбинационного рассеяния света для идентификации одно – и многослойного графена, а также для определения их дефектности. Вторая часть главы посвящена применению методов молекулярной динамики для описания систем с парными центральными и многочастичными ковалентными связями. Проанализированы основные виды термостатов, используемых при моделировании.

**Во второй главе** представлен новый способ получения уравнения состояния инертных газов в рамках метода молекулярной динамики, основанный на обобщении метода вириала силы на случай многочастичных взаимодействий. Метод применен к тяжелым инертным газам, когда существенны трехчастичные поляризационные взаимодействия. Показано, что для ксенона учет трехчастичных взаимодействий позволяет уменьшить ошибку в определении критических параметров с 7% до 2% по отношению к двухчастичным расчетам. При этом, двухчастичные и трехчастичные расчеты критической температуры отличаются на 14.5 К. В этой же главе интерес представляет результат молекулярно-динамического моделирования эволюции Коб-Андерсеновской смеси газов криптона и ксенона вблизи точки конденсации, заключающийся в ее покомпонентном расслоении.

**В третьей главе** методом молекулярной динамики исследованы колебательные свойства графена и графеноподобных структур. Получены силовые постоянные и параметры Грюнайзена. Развита методика, позволившая получить дисперсионные кривые и плотности фононных состояний для различных ГС. Выявлено, что решетка графена может испытывать изгибные колебания мембранного типа, амплитуды которых могут значительно превышать амплитуду тепловых колебаний атомов в решетке. В главе представлены результаты получения графена и графеноподобных структур на сапфировых подложках методом химического осаждения из газовой фазы. Проведена идентификация полученных графеноподобных структур путем сравнения экспериментальных рамановских спектров с теоретическими расчетами.

**Четвертая глава** посвящена новому методу определения эффективности интеркаляции графита атомами калия, основанному на измерении гамма-активности изотопа К-40, реализованному автором в низкофоновых условиях БНО. В главе представлены результаты теоретического и экспериментального исследования процесса интеркаляции высокоориентированного графита атомами металлов. Описан эксперимент по электрохимической интеркаляции рекристаллизованного графита калием и последующим определением концентрации атомов калия в графитовой матрице. При природном содержании

в интеркаляте изотопа К-40 (0,012%), точность метода составила  $10^{-6}$  г/г. Показано, что точность метода изотопных маркеров в низкофоновых условиях может быть доведена до  $10^{-8}$ – $10^{-9}$  г/г при использовании калия, обогащенного изотопом К-40. Полученные в диссертационной работе результаты выполнены на высоком научном уровне, оригинальны и обладают научной новизной.

#### Замечания по диссертационной работе

Диссертационное исследование имеют следующие недостатки и неточности:

1. Несмотря на заключение автора о существенности трехчастичных взаимодействий расчеты для Коб-Андерченновской смеси проведены с двухчастичными взаимодействиями с потенциалом типа Леннарда-Джонса.
2. Почему в знаменателях выражений (3.49) и (3.50) для амплитуд рамановского рассеяния полуширины, связанные с радиационными и фонными переходами, одинаковы?
3. При молекулярно-динамическом моделировании процессов в интеркалированном атомами металла графите для описания взаимодействия между атомами калия и углерода использован потенциал Леннарда-Джонса. На наш взгляд, для данной ситуации требуется использование более сложных потенциалов, учитывающих распределение электронной плотности в многочастичных взаимодействиях, например, потенциал погруженного атома.

В целом приведенные выше замечания не умаляют значимости результатов, полученных в диссертации, и не затрагивают основных выводов и положений, выносимых на защиту. Автореферат диссертации соответствует ее содержанию. Научные результаты диссертации соответствуют пунктам 3, 5 и 6 Паспорта специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния. Материалы исследования детально изложены в 12 опубликованных работах, из которых 6 статей входят в перечень научных изданий, рекомендованных ВАК РФ. Основные результаты исследования обсуждались на представительных всероссийских и международных конференциях.

Диссертационное исследование «Влияние многочастичных взаимодействий на термодинамические свойства инертных газов и колебательную динамику графеноподобных структур» полностью отвечает критериям, установленным Положением ВАК о присуждении ученых степеней, в том числе пункту 9, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, а ее автор – Ахматов Зейтун Ануарович - заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Отзыв подготовлен д. ф.-м. н. (специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния), заведующим отделом кристаллофизики НИИ физики Южного федерального университета профессором Сахненко Владимиром Павловичем (344090, Ростов-на-Дону, пр.Стачки, 194, тел. 8-863-229-57-18, E-mail: sakh@ip.rsu.ru ).

Отзыв обсужден и утвержден на заседании отдела кристаллофизики НИИ физики Южного федерального университета 23 октября 2018 года, протокол № 10.

Заведующий отделом кристаллофизики  
НИИ физики Южного федерального университета,  
доктор физико-математических наук

Сахненко Владимир Павлович

(344090, г. Ростов-на-Дону, пр.Стачки, 194,  
тел. 8-863-229-57-18, E-mail: sakh@ip.rsu.ru)

Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования

«ЮЖНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Личную подпись *Сахненко В.П.*

ЗАВЕРЯЮ:

Специалист по работе с персоналом

1 категории *Иванова И.И.*

« 09 » 11 20 18 г.

