

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.076.02
НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
«КАБАРДИНО-БАЛКАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ ИМ. Х.М. БЕРБЕКОВА» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК**

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 05.12.2018 г. №1

О присуждении Ахматову Зейтуну Ануаровичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Влияние многочастичных взаимодействий на термодинамические свойства инертных газов и колебательную динамику графеноподобных структур» по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, физико-математические науки принята к защите 28.09.2018 г., протокол № 1, диссертационным советом Д 212.076.02 на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» Министерства науки и высшего образования РФ, 360004, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173, созданного приказом № 714/нк от 02.11.2012 г.

Соискатель Ахматов Зейтун Ануарович окончил физический факультет ФГБОУ ВПО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» в 2014 г. В том же году поступил в очную аспирантуру на физический факультет КБГУ (кафедра «Физика конденсированного состояния»). В августе 2018 года Ахматов З.А. окончил аспирантуру с присуждением ему квалификации «Исследователь. Преподаватель-исследователь». С октября 2018 года работает инженером на кафедре теоретической и экспериментальной физики КБГУ.

Диссертация выполнена на кафедре теоретической и экспериментальной физики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова».

Научный руководитель – Хоконов Азамат Хазрет-Алиевич, доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической и экспериментальной физики ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова».

Официальные оппоненты:

Самсонов Владимир Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»;

Борлаков Хиса Шамилович, доктор физико-математических наук, профессор кафедры общепрофессиональных и естественнонаучных дисциплин ФГБОУ ВО «Северо-Кавказская государственная гуманитарно-технологическая академия», дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южный федеральный университет», отдел кристаллофизики, г. Ростов-на-Дону, в своем положительном заключении, подписанном заведующим отделом кристаллофизики НИИ физики Южного федерального университета, доктором физико-математических наук Сахненко В.П. и заверенным специалистом по работе с персоналом 1 категории Малышевой И.В., указал, что диссертационная работа Ахматова З.А. является самостоятельным и завершенным научным исследованием, которое имеет актуальность и несомненную научно-практическую ценность. В заключении отмечается, что представленное диссертационное исследование полностью удовлетворяет всем требованиям, установленным пунктом 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842), а ее автор – Ахматов Зейтун Ануарович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

По теме диссертационной работы с участием автора опубликовано 12 работ, из которых 6 – статьи, опубликованные в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ. Авторский вклад составляет 50%. Общий объем научных изданий составляет 6,9 п.л.

Наиболее значимые из них:

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 ^{85}Kr nuclei / Akhmatov Z. A., Gavrilyuk Yu. M., Gangapshev A. M., Derbin A. V. // 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.
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.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы (отзывы прилагаются):

- 1) *положительный отзыв на автореферат от Куповых Геннадия Владимировича, доктора физико-математических наук, профессора, заведующего кафедрой высшей математики Института компьютерных технологий и информационной безопасности Южного федерального университета (г. Таганрог). Имеются замечания:*
- на рисунке 1 приводится уравнение состояния криптона в относительных единицах, при этом не поясняется, что выбирается за единицы давления и удельного объема;

- используемая в автореферате переменная a имеет различный смысл на странице 8, где она является средним расстоянием между частицами, и на страницах 9-10, где она является параметром в уравнении Ван-дер-Ваальса.

2) *положительный отзыв на автореферат от Комарова Фадея Фадеевича*, доктора физико-математических наук, профессора, член-корреспондента НАН Беларуси, заведующего отраслевой лабораторией элионики - радиационностойкой и космической электроники НИИПФП им. А.Н. Севченко Белорусского государственного университета. Имеются замечания:

- имеются два замечания к формуле (4) на странице 7. Во-первых, в интеграле, содержащем корреляционную функцию, пропущен дифференциал переменной, по которой идет интегрирование. Во-вторых, не оговаривается, до каких расстояний производится суммирование вириала силы в первой скобке;

- межплоскостное расстояние в интеркалированном графите определяется по результатам компьютерного моделирования. Для сравнения, желательно было бы провести прямое измерение межплоскостного расстояния в исследуемом образце стандартными рентгенодифракционными методами.

3) *положительный отзыв на автореферат от Асхадуллина Радомира Шамильевича*, кандидата технических наук, доцента, заместителя директора отделения физико-химических технологий АО Государственного научного центра РФ Физико-Энергетический институт им. А.И. Лейпунского (г. Обнинск). Имеется следующее замечание:

- непонятно, почему силовая постоянная f_1 в уравнении (10) отрицательна и каков физический смысл этого?

4) *положительный отзыв на автореферат от Симоновского Александра Яковлевича*, доктора физико-математических наук, профессора кафедры общей физики института математики и естественных наук СКФУ (г. Ставрополь). Имеется замечание:

- на странице 17 приведено выражение для амплитуды резонансного рамановского рассеяния, однако в автореферате отсутствует сравнение результатов расчетов, основанных на этом выражении с экспериментальными данными, приведенными на рисунках (16) и (17).

5) *положительный отзыв на автореферат от Лубашевского Алексея Владимировича*, кандидата физико-математических наук, с.н.с. Объединенного института ядерных исследований (г. Москва). В качестве замечания отмечает следующее:

- почему исследовали содержание калия таким способом? Не лучше ли было бы использовать масс-спектроскопию?

- почему в фоновых измерениях уровень радона в 1.5 раза выше, чем в измерениях гамма активности от исследуемого образца?

- в заключении сделан вывод, что эффективность метода может быть доведена до 10^{-8} - 10^{-9} г/г, однако это не показано в самом тексте автореферата. Также в тексте автореферата стоило бы привести нынешнюю чувствительность метода;

- при указании значений некоторых полученных величин не приведены их погрешности. В частности, хорошо было бы узнать погрешность оценки массы калия, исходя из анализа полученных данных.

6) *положительный отзыв на автореферат от Маргушева Заура Чамилевича*, кандидата физико-математических наук, в.н.с. отдела компьютерных рентгенооптических систем КБНЦ РАН (г. Нальчик). Имеются замечания:

- из текста автореферата не ясно, на какую глубину была проведена интеркаляция графита калием и какой ступени интеркаляции соответствует полученное соединение;
- имеются недочеты и в оформлении. Так, пропущен номер гармоники n в формуле обращения 16.

7) *положительный отзыв на автореферат от Джаппуева Дахира Данияловича*, кандидата физико-математических наук, с.н.с. лаборатории подземного сцинтилляционного телескопа БНО ИЯИ РАН.

Имеются замечания:

- указанная в работе концентрация изотопа калий-40, равная 0.012%, по-видимому, взята из справочника. На это указывает отсутствие в работе данных по измерению гамма-активности калий содержащих препаратов до их интеркаляции в графит. Считаю, что необходимо было бы провести подобное измерение, так как от этого зависит точность всего метода.

8) *положительный отзыв на автореферат от Хиценко Константина Владимировича*, кандидата физико-математических наук, зав. лабораторией широкодиапазонных уравнений состояния ОИВТ РАН.

Сделаны следующие замечания:

- выражение (4) на странице 7, лежащее в основе вычисления уравнения состояния, включает парные потенциалы только для случая центральных взаимодействий, что ограничивает общность данного выражения, например, не позволяет его применять в случае газа, состоящего из полярных молекул, когда существенно диполь-дипольное взаимодействие;

- вставка на рисунке 2 сопоставляет пунктирной кривой «универсальное распределение», при этом в тексте автореферата не поясняется, что автор подразумевает под этим термином.

Во всех отзывах на диссертацию и авторефераты отмечаются актуальность, новизна исследования, а также большой объем, проделанный соискателем работы. Отмеченные недостатки не снижают актуальности и научной значимости представленной диссертационной работы.

В отзывах отмечается, что диссертационная работа Ахматова З.А. соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением правительства РФ от 24 сентября 2013г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 теплофизика и теоретическая теплотехника.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что:
– официальные оппоненты являются компетентными специалистами в области теоретического и экспериментального изучения свойств слоистых материалов и соединений на их основе. Также являются специалистами в области получения уравнения состояния и изучения свойств материалов методами молекулярной динамики. Их труды по тематике исследования опубликованы в авторитетных научных изданиях;

– Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южный федеральный университет» является авторитетным и широко известным научным центром, специализирующимся в проведении фундаментальных и прикладных научных исследований. В состав университета входит отдел кристаллофизики, в который включает следующие лаборатории: кинетики неупорядоченных сред, мультиферроиков, пирозлектрических и теплофизических исследований, полупроводниковых свойств сегнетоэлектриков, рентгеноструктурного анализа, углеродных систем и учебно-научную студенческую лабораторию нелинейной кристаллофизики.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– **предложена** методика получения уравнения состояния и критических параметров инертных газов с учетом трехчастичных взаимодействий, основанная на использовании вириала силы;

– **получено** уравнение состояния коб-андерсеновской смеси инертных газов и обнаружено покомпонентное расслоения вблизи точки конденсации;

– **показан** универсальный характер распределения частиц по кластерам в зависимости от параметра ранжирования кластеров по размерам;

– **получены** методом молекулярной динамики с использованием потенциалов типа Терсоффа упругие постоянные и параметр Грюнайзена для графена;

– **показан** эффект раскачки поперечных акустических колебаний графена в изотермическом процессе до изгибных колебаний мембранного типа с аномально большими амплитудами, составляющими 10^{-2} длины всего образца;

– **разработана** методика идентификации графеноподобных структур, полученных методом химического осаждения из газовой фазы, по данным рамановского рассеяния на основе компьютерного моделирования динамических и электронных свойств графеноподобных структур;

– **разработана** молекулярно-динамическая модель релаксационных процессов, сопровождающих интеркаляцию высокоориентированного пиролитического графита атомами металлов из газовой фазы;

– **реализован** неразрушающий метод определения эффективности интеркаляции графита калий содержащими соединениями, основанный на низкофоновых измерениях гамма-активности изотопа К-40;

Теоретическая и практическая значимость исследования обоснована тем, что:

в работе развит 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.

Научная новизна проведенных исследований заключается в том, что:

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

- **Обнаружено** покомпонентное расслоение коб-андерсеновской газовой смеси криптона и ксенона вблизи точки конденсации.

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

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

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

О достоверности результатов исследования **говорит следующее:**

- Результаты и следствия из них согласуются с современными экспериментальными и теоретическими данными.

- Полученные в диссертации результаты докладывались на международных и российских конференциях. Используемые установки, приборы и программное обеспечение являются современными и хорошо себя зарекомендовавшими.

Личный вклад соискателя состоит в сборе и изучении научной литературы касательно графена и графеноподобных структур, методов молекулярной динамики. Ахматов З.А. принимал участие на всех этапах исследовательского процесса:

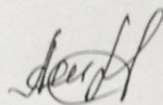
- проводил все молекулярно-динамические расчеты с использованием пакетов LAMMPS и NupurChem, а также самостоятельно разработал программы для построения уравнения состояния инертных газов с учетом трехчастичных взаимодействий и нахождения распределения частиц по кластерам;
- провел эксперимент по электрохимической интеркаляции графита атомами калия, и совместно с сотрудниками Баксанской нейтринной обсерватории ИЯИ РАН низкофоновые измерения содержания в интеркалированных образцах гамма-активного изотопа К-40.
- провел обработку данных экспериментов по рамановскому рассеянию и идентификацию графеноподобных структур, выращенных методом химического осаждения из газовой фазы.

Диссертационная работа Ахматова Зейтуна Ануаровича на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научно-практической задачи, имеющей важное значение для развития физических представлений и методов исследования структурных и динамических свойств графена и графеноподобных материалов.

На заседании 05.12.2018 г. диссертационный совет принял решение присвоить Ахматову З.А. учёную степень кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 10 докторов наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, физико-математические науки, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за - 18, против - 0, недействительных бюллетеней - 0.

Председательствующий на заседании
диссертационного совета
д.ф.-м.н., профессор



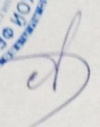
О.Г. Ашхотов

Председатель диссертационного
совета Д 212.076.02
д. ф.-м. н., профессор



Х.Б. Хоконов

Ученый секретарь
диссертационного совета Д 212.076.02
д. ф.-м. н., профессор



А.А. Ахкубеков