

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Сеницы Александра Сергеевича «Теоретическое исследование трансформации углеродных материалов в каталитических и неравновесных системах», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук, специальность 01.04.17 - Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

В последние годы наблюдается повышенный интерес к разработке новых методов синтеза и исследованию физико-химических свойств углеродных наноструктур (УНС), к числу которых относятся фуллерены, углеродные нанотрубки и графен, а также различных композитных систем на их основе. Поскольку детальные механизмы образования подобных структур до конца не установлены, их исследование представляет фундаментальный интерес с точки зрения увеличения объема знаний о физико-химической природе вещества и её более глубокому пониманию. А уникальные физико-химические свойства (электро- и теплопроводность, термическая и химическая стабильность, механическая прочность), которые обнаруживаются для почти каждого нового синтезированного материала на основе УНС, делают эти структуры весьма привлекательными с точки зрения использования в новых технологиях и устройствах. По этим причинам усилия многих научных коллективов во всем мире направлены на решение проблем синтеза, исследования физико-химических свойств и установление основных путей практического использования подобных новых материалов.

В силу технических и материальных трудностей, связанных с экспериментальными исследованиями различных наноструктур, важную роль в получении информации о происходящих в них процессах играет численное моделирование. Диссертационная работа Сеницы А.С. является удачным примером использования современных методов компьютерного моделирования для исследования атомарных процессов. В ней приводится детальное изучение на атомистическом уровне различных механизмов синтеза новых, в том числе ранее недоступных композитных структур на основе фуллеренов. Представленное в диссертации моделирование объясняет экспериментальные данные по синтезу

эндоэдральных металлофуллеренов (ЭМФ) с атомами никеля внутри, с использованием нового, совсем недавно предложенного метода синтеза. Тем самым **актуальность** тематики диссертационной работы А.С. Сеницы не вызывает сомнений.

Несмотря на то, что данный метод синтеза ЭМФ путем облучения электронами кластеров никеля, окруженных аморфным углеродом в просвечивающем электронном микроскопе, был предложен буквально несколько лет назад, он уже показал свою эффективность для создания новых типов ЭМФ. Т.е. **практическая значимость** проведенного автором теоретического исследования, объясняющего эти экспериментальные результаты, также совершенно очевидна. Помимо этого, исследованные в работе закономерности процессов образования фуллеренов из кластеров аморфного углерода или чешуек графена под действием облучения дополняют имеющиеся знания о механизмах образования и трансформации углеродных наноструктур, что обосновывает **научную новизну** работы.

В первой главе дается литературный обзор как теоретических, так и экспериментальных работ, посвященных образованию углеродных наноструктур и синтезу гетероструктур на их основе. В целом литературный обзор объективно и грамотно отражает современное состояние рассматриваемой проблемы. Однако, как справедливо отмечено в этой главе, механизмы образования УНС сложны и не до конца установлены, что говорит о необходимости дальнейших исследований в этой области.

Во второй главе дается описание методики моделирования, которая позволила успешно решить задачи диссертационной работы. В работе применяются современные численные методы, активно используемые для теоретических исследований процессов на атомистическом уровне. Проведенная автором верификация новой версии потенциала Бреннера является важным вкладом в развитие этих методов.

В главах 3, 4 и 5 приводятся основные результаты работы, среди которых следует отметить следующие:

1. Впервые исследованы процессы самоорганизации небольших кластеров аморфного углерода из 60-70 атомов (глава 3 диссертации). Определен двухстадийный механизм трансформации таких кластеров в фуллерен. Обнаруженные реакции перестройки связей в формирующейся углеродной оболочке применимы для описания образования фуллеренов в том числе и в других системах. Это говорит о том, что полученные результаты дополняют знания об общем механизме образования фуллеренов в различных системах и имеют, тем самым, фундаментальное значение. Другим важным новым результатом является впервые теоретически установленный факт, что фуллерены без дефектов могут быть получены из первоначально неупорядоченной аморфной системы.

2. На примере трансформации чешуйки графена с прикрепленным кластером никеля рассмотрено совместное действие катализатора (кластера Ni) и облучения электронами (глава 4 диссертации). В работе продемонстрирована возможность получить новый тип структур при такой трансформации, а именно, гетерофуллеренов, в которых кластер металла полностью встраивается в углеродную оболочку (обозначены в работе как «patched fullerene»). Результаты проведенного исследования показывают возможность контролируемого синтеза этих структур. Подробно исследован механизм их образования, выделены основные реакции, связанные с облучением электронами и каталитическим влиянием кластера металла.

3. Проведено теоретическое исследование, объясняющее новые экспериментальные данные по синтезу ЭМФ и гетерофуллеренов (глава 5 диссертации). Предложенный в работе механизм образования ЭМФ достаточно точно описывает экспериментально наблюдаемую трансформацию углеродного материала. Подробно обсуждено влияние равновесных и неравновесных факторов на процесс трансформации. Кроме этого, проанализирована возможность синтеза таких структур в условиях, недоступным для рассмотрения в данном эксперименте, что важно для развития методов синтеза таких структур в макроколичествах.

Достоверность полученных результатов обеспечена использованием современных методик моделирования и прямым сравнением с экспериментом.

Диссертация представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, результаты которой имеют существенное значение для физики углеродных наноструктур. Вместе с тем, по работе есть некоторые замечания:

1. В работе практически не обсуждаются другие процессы, которые могут быть индуцированы электронами в углеродных материалах. Так, хотя экспериментальные данные указывают на то, что электроны с рассматриваемыми энергиями в основном упруго рассеиваются на атомах углерода, что и использовано при выборе методики моделирования, оценка вклада других процессов, например, ионизации и прямой диссоциации, неплохо дополнило бы работу.

2. В работе уместно было бы обсуждение возможного практического применения исследованных композитных структур. Такое дополнение украсило бы работу.

3. На мой взгляд, слишком много пунктов в разделе «Заключение». Количество выводов стоило бы уменьшить и укрупнить, путем совмещения имеющихся.

Несмотря на отмеченные замечания, в целом диссертационная работа А.С. Синицы производит весьма благоприятное впечатление. Основные результаты, полученные в диссертации, опубликованы в научных журналах очень высокого уровня и доложены на многих конференциях. Они хорошо известны специалистам и уже цитируются, что указывает на влияние работ автора на развитие соответствующего направления и говорит о практической ценности результатов и их значимости для науки и производства. Полученные результаты могут быть использованы в различных организациях, занимающихся синтезом углеродных материалов и композитов на их основе.

Публикации полностью отражают основные положения и выводы диссертационной работы. Автореферат диссертации в полной мере соответствует её содержанию.

Рассмотренная диссертация «Теоретическое исследование трансформации углеродных материалов в каталитических и неравновесных системах» удовлетворяет требованиям раздела II Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842, а соискатель Сеница Александр Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

Доктор физико-математических наук,
профессор, главный научный сотрудник
лаборатории функциональных наноконструкций
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Федерального исследовательского
центра химической физики им. Н.Н. Семенова
Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)
119991, Москва, ул. Косыгина, 4,
тел. +7(495)-939-73-86,
e-mail: litrakh@gmail.com



Трахтенберг Леонид Израйлевич

Подпись Трахтенберга Л.И. заверяю:



Учёный секретарь ФИЦ ХФ РАН

12.11.2013

к.ф.-м.н.



Ларичев Михаил Николаевич