

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 520.009.05 НА БАЗЕ
НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА «КУРЧАТОВСКИЙ
ИНСТИТУТ» (ПРИНАДЛЕЖНОСТЬ – ПРАВИТЕЛЬСТВО РФ) ПО ДИССЕРТАЦИИ
СИНИЦЫ АЛЕКСАНДРА СЕРГЕЕВИЧА «ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ
ТРАНСФОРМАЦИИ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ В КАТАЛИТИЧЕСКИХ И
НЕРАВНОВЕСНЫХ СИСТЕМАХ» НА СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 17.12.2019 г., № 7

О присуждении СИНИЦЕ Александру Сергеевичу, гражданину РФ, учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Теоретическое исследование трансформации углеродных материалов в каталитических и неравновесных системах» принята к защите 08.10.2019 г. протокол № 6 диссертационным советом Д 520.009.05 на базе Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (Правительство РФ), 123182 г. Москва, пл. академика И.В. Курчатова, д. 1 (утвержден Приказом Минобрнауки России № 1925-1018 от 08.09.2009 г. и переутверждён приказом Минобрнауки России № 105/нк от 11.04.2012г.).

Соискатель Синица Александр Сергеевич, 1991 года рождения.

Соискатель в 2014 году окончил факультет молекулярной и химической физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)» по специальности «Прикладные математика и физика». Диплом магистра выдан 19.06.2014 г., регистрационный номер 14604011.

В период подготовки диссертации соискатель работал в должности инженера-исследователя в лаборатории теоретических исследований отделения плазменных технологий (ОПТ) Курчатовского комплекса физико-химических технологий (ККФХТ) Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (НИЦ «Курчатовский институт»). В настоящее время работает в должности инженера-исследователя в лаборатории источников излучения ОПТ ККФХТ НИЦ «Курчатовский институт».

Научный руководитель – Книжник Андрей Александрович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории теоретических исследований Курчатовского комплекса физико-химических технологий НИЦ

«Курчатовский институт».

Соискатель в период с 25 августа 2014 года по 24 августа 2018 года обучался в очной аспирантуре НИЦ «Курчатовский институт» по направлению подготовки 03.06.01 – «Физика и астрономия» по специальности 01.04.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» и сдал все кандидатские экзамены с оценкой «отлично». Диплом об окончании аспирантуры выдан НИЦ «Курчатовский институт» 03.07.2018 г.

Официальные оппоненты:

- Трахтенберг Леонид Израйлевич, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией функциональных нанокомпозитов Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, г. Москва);

- Вуль Александр Яковлевич, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией физики кластерных структур Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, г. Санкт-Петербург

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация:

Федеральное государственное учреждение «Федеральный научно-исследовательский центр «Кристаллография и фотоника» Российской академии наук» (ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН), в своём положительном заключении, подписанном Авакяном В.Г., кандидатом химических наук, доцентом, ведущим научным сотрудником лаборатории квантовой химии и молекулярного моделирования Центра фотохимии РАН, и утвержденном директором ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН Алексеевой О.А., указала, что представленная диссертационная работа обладает высокой актуальностью и в полной мере отражает решение задачи по объяснению различных аспектов процессов синтеза фуллеренов и гетероструктур на их основе. Особо отмечено хорошее согласие результатов проведенного моделирования с экспериментальными данными. Из наиболее важных научных результатов и достижений, полученных в диссертационной работе, в отзыве ведущей организации отмечаются следующие:

1. Предложен оригинальный физический механизм, обосновывающий экспериментально наблюдаемое образование эндодральных металлофуллеренов с помощью нового, недавно предложенного метода синтеза.
2. Впервые предсказаны новые гетероструктуры типа «patched fullerene», впоследствии также полученные экспериментально.

3. Впервые при помощи численного эксперимента исследован механизм трансформации кластеров аморфного углерода из 60–70 атомов в фуллерен, обнаружены неизвестные ранее реакции вставки углеродных цепочек в оболочку фуллерена. Данный результат имеет важное значение для разработки общего механизма формирования оболочки фуллеренов, который до сих пор не до конца известен.
4. Впервые показана возможность получить фуллерены без дефектов из неупорядоченной аморфной системы.
5. Показана возможность контролируемого синтеза нового типа металл-углеродной гетероструктуры («фуллерен с заплаткой-кластером металла»).
6. Проведенное в работе исследование механизмов экспериментально наблюдаемого образования фуллеренов вокруг кластеров металла может потенциально стимулировать появление новых методов синтеза ЭМФ.
7. Показана возможность синтеза эндоэдральных фуллеренов с кластерами с заданным наперед размером; для существующих до сих пор методов размеры кластера были ограничены 7 атомами.

В конце отзыва содержится утверждение: «Диссертация представляет собой целостное и завершенное научное исследование, выполненное автором самостоятельно и на высоком уровне. Диссертация «Теоретическое исследование трансформации углеродных материалов в каталитических и неравновесных системах» полностью соответствует разделу II Положения о порядке присуждения ученых степеней, утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а соискатель Синица Александр Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 - Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Соискатель имеет 3 научные работы в периодических изданиях из Перечня ВАК по теме диссертации:

1. Sinitsa A. S., Lebedeva I. V., Knizhnik A. A., Popov A. M., Skowron S. T., Bichoutskaia E. Formation of nickel–carbon heterofullerenes under electron irradiation// Dalton Transactions. 2014. Vol. 43. Is. 20. P. 7499–7513.
2. Sinitsa, A. S., Chamberlain, T. W., Zoberbier, T., Lebedeva, I. V., Popov, A. M., Knizhnik, A. A., McSweeney, R. L., Biskupek, J., Kaiser, U., Khlobystov, A. N. Formation of Nickel Clusters Wrapped in Carbon Cages: Toward New Endohedral Metallofullerene Synthesis// Nano Letters. 2017. Vol. 17. Is. 2. P. 1082–1089.

3. Sinitsa A. S., Lebedeva I. V., Popov A. M., Knizhnik A. A. Transformation of Amorphous Carbon Clusters to Fullerenes// Journal of Physical Chemistry C. 2017. Vol. 121. Is. 24. P. 13396–13404.

По своему содержанию все работы посвящены исследованию трансформации различных углеродных материалов при нагреве и при облучении электронами.

На автореферат поступило 5 отзывов. Все отзывы положительные.

1. Отзыв из НИЦ «Курчатовский институт». Отзыв подписан Хромовым Константином Юрьевичем, доктором физико-математических наук, начальником лаборатории моделирования перспективных материалов ККПАЭ НИЦ «Курчатовский институт», г. Москва. В качестве недостатков отмечено «то, что в тексте не приведены энергетические характеристики элементарных процессов трансформации рассмотренных наноструктур и слишком конспективно описаны параметры проведенного моделирования».
2. Отзыв из Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт Спектроскопии РАН (ИСАН)». Отзыв подписан Лозовиком Юрием Ефремовичем, кандидатом физико-математических наук, профессором, заведующим лабораторией спектроскопии наноструктур ФГБУН «Институт Спектроскопии РАН (ИСАН)». В отзыве отмечено, что «после его [автореферата] прочтения остается не вполне понятным вклад автора в модификацию использованных методов моделирования.».
3. Отзыв из Сколковского института науки и технологий. Отзыв подписан Жиляевым Петром Александровичем, кандидатом физико-математических наук, научным сотрудником. В отзыве отмечены два замечания: (1) «рассмотрение только никелевых кластеров. Было бы интересно изучить взаимодействие углеродных наноструктур с другими видами типичных металлических кластеров, таких как золотые или серебряные кластеры» и (2) «то, что при рассмотрении углеродной чешуйки с присоединенным кластером никеля не учитывается влияние подложки, на которой находится чешуйка в реальных ПЭМ экспериментах».
4. Отзыв из Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ», г. Москва. Отзыв подписан Масловым Михаилом Михайловичем, кандидатом физико-математических наук, доцентом Института нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике НИЯУ «МИФИ». Замечаний не содержит.
5. Отзыв из Национального исследовательского технологического университета «МИСиС», г. Москва. Отзыв подписан Сорокиным Павлом

Борисовичем, доктором физико-математических наук, доцентом, профессором НИТУ «МИСиС», ведущим научным сотрудником лаборатории «Неорганические материалы» НИТУ «МИСиС». В отзыве отмечено два замечания: (1) «[В автореферате] параметры молекулярно-динамического моделирования приведены не полностью и не позволяют оценить объем сделанных вычислений и их точность» и (2) «не совсем понятна мотивация выбора межатомного потенциала».

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией функциональных нанокompозитов Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова РАН Трахтенберг Леонид Израйлевич является известным специалистом в области физики наноструктур, теории элементарных процессов и химической физики. Значительная часть его работ посвящена исследованию функциональных нанокompозитов, что напрямую связано с тематикой диссертационной работы.

Доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией физики кластерных структур Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН Александр Яковлевич Вуль является одним из ведущих российских специалистов в области физики углеродных кластеров, физико-химических свойств фуллеренов и других углеродных наноструктур, что также полностью соответствует тематике диссертационной работы.

«Центр фотохимии Российской академии наук (ЦФ РАН)», структурное подразделение ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН, является известным центром, в котором ведутся экспериментальные и теоретические исследования синтеза новых химических соединений, в частности, супрамолекулярных нано-, микро- и макроструктур. В лаборатории квантовой химии и молекулярного моделирования ЦФ РАН ведутся многолетние работы по атомистическому моделированию наноструктурированных материалов, работы по исследованию элементарных реакций в равновесных системах и в системах под действием облучения, а также разрабатываются собственные методы для компьютерного моделирования наноструктурированных органических и гибридных материалов и систем.

Диссертационный совет отмечает, что **полученные соискателем результаты заключаются в следующем:**

1. Теоретически **установлена возможность** образования фуллеренов из небольших кластеров аморфного углерода при нагреве. Предложен оригинальный физический механизм трансформации, выявлены две стадии трансформации с разным временным масштабом. Выявлены и подробно исследованы реакции перегруппировки связей в структуре в процессе вставки углеродных цепочек в оболочку фуллерена непосредственно перед завершением её формирования. Также впервые продемонстрировано, что фуллерены без дефектов могут быть получены из первоначально неупорядоченной аморфной системы.

2. **Предсказана возможность образования нового типа структур** – гетерофуллеренов типа «фуллерен с заплаткой» («patched fullerene») из чешуек графена с прикрепленными кластерами металла при облучении электронами. Рассчитанные в работе времена трансформации и времена жизни полученных в моделировании гетероструктур говорят о возможности контролировать все этапы синтеза для достижения максимального выхода таких гетероструктур. На примере образования данной системы установлено, что совокупное влияние на кинетику трансформации наличия катализатора-кластера металла и воздействия электронного облучения довольно слабое. Так, среднее время трансформации чешуйки с кластером при облучении не намного меньше, чем чешуйки без кластера.

3. **Объяснены экспериментальные данные** по синтезу эндоэдральных металлофуллеренов (ЭМФ) из никелевых кластеров, окруженных аморфным углеродом при облучении электронами. Наблюдаемые в моделировании структуры внешне соответствуют наблюдаемым экспериментально в ПЭМ ВР, полученное при моделировании среднее время образования ЭМФ и накопленная в ходе расчета доза облучения хорошо коррелирует с характерными временными масштабами и дозами, наблюдаемыми в экспериментах. Предложен оригинальный физический механизм экспериментально наблюдаемого образования ЭМФ. Хорошее согласие между параметрами структуры и дозы облучения, полученными в моделировании, и измеренными экспериментально, говорит о достоверности предложенного в работе оригинального механизма образования ЭМФ. Также показано, что синтез таких структур возможен в других условиях, помимо использованных в эксперименте.

Теоретическая значимость исследования состоит в том, что положения, предложенные соискателем на основе интерпретации полученных результатов,

позволяют объяснить ряд экспериментально наблюдаемых явлений, для которых до сих пор не существовало теоретического обоснования. Установленные в работе закономерности образования фуллеренов и гетероструктур на их основе имеют общий характер и применимы для описания их образования в других системах.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики состоит в том, что в работе продемонстрирована возможность синтеза новых гетероструктур на основе фуллеренов, оценены их стабильность, исследованы условия, позволяющие добиться их наиболее эффективного синтеза. Проведенное автором теоретическое исследование объясняет экспериментальные данные по синтезу ЭМФ из кластеров Ni, окруженных аморфным углеродом, при облучении электронами. Это открывает возможности для производства новых типов ЭМФ и может потенциально стимулировать появление новых, более эффективных методов синтеза таких наноструктур.

В диссертационной работе Сеницы А. С. представлены актуальные и значимые с практической точки зрения результаты, которые могут быть использованы при планировании экспериментов по синтезу углеродных гетероматериалов в различных системах. Результаты могут быть использованы в ФГБНУ ТИСНУМ, Физико-техническом институте им. Иоффе РАН, Институте проблем химической физики РАН, Институте неорганической химии СО РАН, а также в других организациях, занимающихся синтезом новых углеродных материалов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила: **достоверность** полученных результатов обеспечена использованием современных методов численного моделирования, адекватно примененных для решаемых задач, и прямым сравнением с имеющимися экспериментальными данными.

Личный вклад соискателя состоит в подборе параметров моделирования, проведении серии численных экспериментов, обработке полученных результатов, их интерпретации. Постановка задач и выбор рассматриваемых систем проводились автором совместно с научным руководителем и научной группой. При непосредственном и активном участии соискателя подготовлены к печати публикации по выполненной работе.

В соответствии с п. 9 «Положения о присуждения учёных степеней» результаты, полученные в диссертации А.С. Сеницы, следует квалифицировать как существенный вклад в развитие области исследований химической физики углеродных наноструктур.

Диссертационный совет пришел к выводу, что диссертационная работа Сеницы А.С. «Теоретическое исследование трансформации углеродных материалов в каталитических и неравновесных системах» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842.

На заседании 17 декабря 2019 г. Диссертационный совет принял решение присудить Сенице Александру Сергеевичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования Диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 6 докторов наук по специальности диссертации, участвовавших в заседании из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовал:

за присуждение ученой степени – 17,

против присуждения ученой степени – 0,

недействительных бюллетеней – 0.

Протокол счетной комиссии утвержден открытым голосованием единогласно.

Председатель
диссертационного совета, д.х.н.

Ученый секретарь
диссертационного совета, д.х.н., проф.



Чайванов Б.Б.

Серик В.Ф.

17.12.2019 г.