

## 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.

Диссертация Сеницы Александра Сергеевича «Теоретическое исследование трансформации углеродных материалов в каталитических и неравновесных системах» посвящена компьютерному моделированию углеродных материалов и их агрегатов с металлическими кластерами. Данная тема, несомненно, находится на переднем крае современной науки и привлекает большой интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения. Таким образом, актуальность темы работы бесспорна. Особо стоит отметить, что исследование проведено *in silico*, т.е. новые знания об изучаемой системе получены в полностью синтетическом эксперименте на компьютере. Разработка и апробация таких методик представляет отдельную ценность, с большой вероятностью именно такие методы исследования займут большую часть научного ландшафта уже в ближайшие десятилетия. Это, а также непосредственное сопоставление полученных результатов с экспериментами, говорит о высокой практической ценности результатов и их значимости для науки. Все полученные в диссертации результаты и сформулированные выводы представляются достоверными, научная новизна положений, выводов и рекомендаций очевидна.

Среди недостатков данной работы можно отметить следующее:

1. В параграфе 2.4 Главы 2, где речь идет о разработке и верификации нового силового поля (расширенный потенциал Бреннера), отсутствует четкое описание алгоритма подбора параметров потенциала, а также критерии,

при достижении которых можно считать данную оптимизационную задачу решенной. Складывается впечатление, что автор и его коллеги просто попробовали несколько более-менее случайных наборов параметров, а потом выбрали один из них просто на основании своей интуиции.

2. При моделировании одновременного влияния температуры и излучения на время трансформации графен-фуллерен (раздел 4.2.1) найдены условия, при которых вклад от облучения доминирует над температурным. Однако, для выбранных условий не определен вклад только от температурных трансформаций и, следовательно, невозможно количественно оценить насколько оправданно говорить о трансформации только под действием излучения.
3. Во всей Главе 5 автор предполагает, что структура внешней нанотрубки, и даже ее ярко-выраженный дефект никак не могут релаксировать, не подвержены воздействию излучения и температурным трансформациям, т.е. «вморожены» в пространство. Это допущение представляется совершенно нереалистичным и, более того, на экспериментальных фотографиях (с которыми идет сопоставление по ходу изложения, напр. Рис. 1.6) явно заметны некоторые изменения в структуре окружающей фуллерен нанотрубки.
4. Название диссертации «Теоретическое исследование трансформации углеродных материалов в каталитических и неравновесных системах» представляется оппоненту слишком обобщающим и многообещающим. По существу, в работе речь идет только о формировании фуллеренов, а метод исследования – исключительно компьютерное моделирование.

Отмеченные недостатки не снижают общую положительную оценку представленной работы. Содержание работы полностью соответствует

указанной специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества. Все основные положения и выводы диссертации опубликованы в изданиях, входящих в Web of Science и «перечень ВАК». Автореферат соискателя в полной степени отражает положения, выводы и рекомендации, содержащиеся в диссертации, а вся работа в целом полностью соответствует разделу II Положения о порядке присуждения ученых степеней, утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842. Считаю, что 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.

кандидат физико-математических наук,  
старший научный сотрудник  
кафедры физики полимеров и кристаллов  
отделения физики твердого тела  
физического факультета  
МГУ имени М. В. Ломоносова

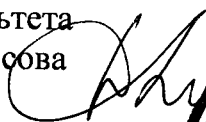


Чертович Александр Викторович

тел. +7495-939-1013,  
e-mail chertov@polly.phys.msu.ru

Подпись Чертовича А. В. заверяю:

Декан физического факультета  
МГУ имени М. В. Ломоносова  
профессор



Николай Николаевич

28.12.2018



Зам. зав. кафедрой *Александр* *Сеница* *М. В.*