

## **ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА**

**Д 520.009.05 на базе Национального исследовательского центра**

**«Курчатовский институт»**

по диссертации СИНИЦЫ Александра Сергеевича **«Теоретическое исследование трансформации углеродных материалов в каталитических и неравновесных системах»** на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований объяснены экспериментальные данные по синтезу эндоэдральных металлофуллеренов (ЭМФ) с использованием нового метода, предложенного научной группой, в состав которой входил автор. В представленной работе проведено теоретическое исследование процессов образования фуллеренов и гетероструктур на их основе из других углеродных материалов в каталитических и неравновесных системах, исследованы механизмы трансформации углеродных наноструктур: небольших кластеров аморфного углерода и чешуек графена при наличии катализатора – кластера никеля при нагреве и при облучении электронами в просвечивающем электронном микроскопе высокого разрешения (ПЭМ ВР).

**Наиболее существенные научные результаты**, полученные соискателем, состоят 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 на много 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 коррелируют 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 присуждении 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 5 февраля 2019 г. Диссертационный совет принял решение присудить Сенице Александру Сергеевичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования Диссертационный совет в количестве 21 человек, из них 6 докторов наук по специальности диссертации, участвовавших в заседании из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовал:

за присуждение ученой степени – 21,  
против присуждения ученой степени – 0,  
недействительных бюллетеней – 0.

Протокол счетной комиссии утвержден открытым голосованием: единогласно.