

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ

диссертации 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.

Моделирование процессов, происходящих в углеродных наноматериалах, является необходимым для детального понимания физико-химических механизмов формирования и поведения углеродных систем при различных внешних условиях. Для реализации перспектив применения углеродных наноструктур требуется оптимизация условий их синтеза, что в свою очередь требует детального анализа механизмов их структурных преобразований. Представленная работа посвящена именно этой актуальной теме, а одним из главных достоинств проведенного теоретического исследования является прямая связь с имеющимися экспериментальными данными.

Автором проведено теоретическое исследование процессов радиационной трансформации гетерогенных металл-углеродных систем, в частности, поставлены численные эксперименты, объясняющие новейшие эксперименты по синтезу фуллеренов и гетероструктур на их основе. Таким образом, практическая значимость работы очевидна. О научной новизне полученных результатов говорят, например, предсказанные в работе новые гетероструктуры на основе фуллеренов.

Моделирование процессов трансформации углеродных наноматериалов, в том числе в каталитических неравновесных системах, проведено с использованием современных методов расчета. Представленные результаты докладывались и обсуждались на международных научно-технических конференциях. По теме диссертации опубликовано 3 статьи в рецензируемых научных журналах (Web of Science и Scopus). Это говорит о достоверности полученных результатов и хорошей апробации работы.


Главным результатом работы является сформулированный автором оригинальный физический механизм, объясняющий экспериментальные данные по синтезу эндодральных металлофуллеренов с использованием метода, недавно разработанного экспериментальной научной группой, и подробно исследованы факторы, влияющие на максимальный выход ЭМФ в различных условиях. Предложенные автором механизмы образования фуллеренов из различных начальных систем имеют общий характер и применимы для описания процессов в том числе и в других экспериментах по их синтезу.

В основе подхода, используемого автором данной работы, лежит метод классической молекулярной динамики. В данной работе основное внимание уделяется исследованию кинетических процессов на микроуровне в процессе трансформации углеродных материалов при различных условиях с последующим обобщением наблюдаемых реакций и формулированием общих закономерностей исследуемых процессов. В отличие от некоторых других работ на аналогичную тему, автор не ограничивается описанием полученных численных результатов, а проводит глубокий анализ их физического содержания с последующей интерпретацией, что позволит сформулировать ряд положений, имеющих практическое и фундаментальное значение для физики и химии углеродных наноструктур.

К замечаниям можно отнести рассмотрение только никелевых кластеров. Было бы интересно изучить взаимодействие углеродных наноструктур с другими видами типичных

металлических кластеров, таких как золотые или серебряные кластеры. Такого рода исследование позволили бы обнаружить и описать общие закономерности во взаимодействии с углеродных наноструктур с металлическими кластерами. Вторым замечанием является то, что при рассмотрении углеродной чешуйки с присоединенным кластером никеля не учитывается влияние подложки, на которой находится чешуйка в реальных ПЭМ экспериментах. По моему мнению, описанные выше замечания не оказывают существенного влияния на полученные результаты и качество исследования.

На основании представленного автореферата можно заключить, что работа полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым к научно-квалификационным работам аспиранта и кандидатским диссертациям по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества (постановление Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842), а соискатель 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,
научный сотрудник,

Сколковский институт науки и технологий
Жиляев Петр Александрович

Тел: +7(926)108 56 88

Email: p.zhilyaev@skoltech.ru

Адрес: 143026, Московская обл. Москва, улица Нобеля, 3.

«30» сентября 2019 г.

Подпись П.А. Жиляева подтверждаю:

Руководитель отдела
Кадрового администрирования
Бурденко Н.Г.

