

## ОТЗЫВ

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

Диссертационное исследование посвящено важному и быстроразвивающемуся направлению исследований свойств углеродных наноматериалов, а именно изучению механизмов роста наноструктур. В частности, проведены исследования возможности получения фуллеренов из небольших кластеров аморфного углерода при высокой температуре, совместного воздействия облучения электронами и катализатора в виде кластера никеля на процессы трансформации углеродных наноматериалов, процесса образования эндоэдральных металлофуллеренов при трансформации аморфного углерода с прикрепленным кластером металла при облучении электронами внутри углеродной нанотрубки и анализу механизмов трансформации углеродных наноструктур и механизмов образования металл-углеродных гетероструктур. Изучена роль кластера металла и его влияние на общую кинетику трансформации.

Следует отметить, что диссертантом успешно решена сложная теоретическая задача по прямому моделированию процесса образования наноструктур. Это потребовало аккуратной подборки потенциала взаимодействия между атомами, использования оригинальных алгоритмов, позволяющих проводить моделирование воздействия электронного пучка в секундном временном диапазоне. Высокое качество сделанных теоретических предсказаний подтвердила совместная экспериментально-теоретическая работа по наблюдению трансформации кластера металла, окруженного аморфным углеродом, при облучении электронами. В частности, представлено объяснение экспериментальных данных по синтезу эндоэдральных металлофуллеренов из никелевых кластеров. Полученное при моделировании среднее время образования металлофуллеренов и накопленная в ходе расчета доза облучения хорошо коррелирует с характерными временами и дозами, наблюдаемыми в экспериментах. Следует отметить, что результаты последней работы опубликованы в ведущем научном журнале *Nano Letters*, причём в статье диссертант является первым автором, что однозначно говорит о его основном вкладе в данную работу.

Результаты, представленные в диссертации, позволяют сделать однозначный вывод, что сделанная работа вносит вклад в решение актуальных задач, стоящих перед материаловедением углеродных наноструктур.

Следует отметить, что автореферат не свободен от недостатков.

Параметры молекулярно-динамического расчёта приведены не полностью и не позволяют оценить объём сделанных вычислений и их точность. Например, не приведена информация о временном шаге молекулярно-динамического расчёта, являющегося важнейшим параметром, особенно в свете того, что длительностью расчёта составляла значительные времена.

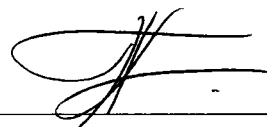
Не совсем понятно мотивация выбора межатомного потенциала – аргументы о корректном воспроизведении энергии различных краев графена и упругой энергии фуллере-

нов не кажутся достаточными. Более важными кажутся корректное описание химической активности углеродных поверхностей в различных состояниях, взаимодействия атомов углерода и металла. Впрочем, данная информация возможно не была приведены из-за ограничения по объёму автореферата.

Несмотря на описанные недостатки, работа Сеницы А.С производит отличное впечатление и представляет собой законченный труд, имеющий безусловную научную ценность. Работа полностью соответствует требованиям п. 8 "Положения о порядке присуждения учёных степеней", а её автор Сеница Александр Сергеевич заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества.

ведущий научный сотрудник  
лаборатории «Неорганические наноматериалы»  
Федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего  
образования "Национальный исследовательский  
технологический университет «МИСиС»",  
д.ф.-м.н., доцент, профессор НИТУ «МИСиС»  
119049, Ленинский проспект 4, Москва,  
Российская Федерация  
Телефон: +7 (916) 47 46 664

E-mail: pbsorokin@isis.ru



Сорокин П.Б.



Подпись Сорокина П.Б. заверяю



КУЗНЕЦОВА А.Е.

19.11.192