

## О Т З Ы В

официального оппонента на диссертацию Данилова Сергея Владимировича «Моделирование атомной структуры и рентгеноструктурный анализ углеродных нанотрубок», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния.

Исследование структуры наноуглеродных материалов является одним из актуальных направлений современной науки. Особый интерес в последние годы связан с исследованием углеродных нанотрубок (УНТ), благодаря их уникальным электрическим, магнитным, оптическим и механическим свойствам. УНТ вызывают огромный интерес как перспективные материалы в качестве базовых элементов нанотехнологии и наноэлектроники.

Для успешного использования углеродных нанотрубок необходимо знание их структуры, которая и определяет уникальные свойства УНТ. Прямым методом определения структуры, позволяющим получать интегральные характеристики материала, является рентгенодифракционный метод. Однако рентгенографическое изучение углеродных материалов в некристаллическом состоянии, которое характерно для УНТ, является весьма сложной практической задачей. Это связано как с некристаллическостью образцов, так и с тем, что существует большое разнообразие типов связей атомов углерода в них, что существенно затрудняет интерпретацию экспериментальных спектров. Поэтому развитие методов компьютерного моделирования структуры УНТ и методов расчета теоретических дифракционных картин рассеяния от них является важной и актуальной задачей физики конденсированного состояния. Именно решению этих вопросов и посвящена диссертационная работа С.В. Данилова.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, три из которых являются оригинальными, заключения, списка литературы и приложения.

Во введении рассматривается актуальность тематики диссертационной работы, сформулированы ее цели и задачи, обоснованы основные положения, выносимые на защиту, научная новизна и практическая значимость работы.

В первой главе автор представляет основные литературные сведения о различных аллотропных модификациях углерода, особенностях их строения и свойствах различных по конфигурациям УНТ. Кроме того, диссертантом проведен критический анализ имеющихся в литературе алгоритмов и программ по моделированию структуры УНТ и их дифракционным исследованиям.

Вторая глава посвящена описанию разработанных в диссертационной работе алгоритмов расчета координат атомов в случае однослойный УНТ типа «зиг-заг» и «кресло», в хиральных и многослойных нанотрубках типа «русская матрешка» и «свиток». Также представлены алгоритмы внесения искажений в идеальную структуру нанотрубок из-за смещения атомов относительно их положений равновесия, в случае формирования плотно упакованных структур в виде «сростков» УНТ, состоящих из одинаковых нанотрубок, и в случае формирования моделей, состоящих из набора структур, случайным образом ориентированных в пространстве друг относительно друга. Представлена методика расчета модельных дифракционных картин, в основу расчета интенсивности рассеяния которых положена модифицированная формула Дебая. Также представлена, разработанная на КФТТ Петрозаводского госуниверситета, методика обработки экспериментальных кривых распределения интенсивности рассеяния рентгеновских лучей и расчета на их основании интерференционных функций и кривых распределения парных функций в случае некристаллических материалов.

Несомненным достоинством диссертанта является то, что в Приложении к диссертационной работе им представлены: блок-схема алгоритмов расчета координат атомов в моделях однослойных и многослойных УНТ различных конфигураций; блок-схема моделирования смещений атомов относительно

их положений равновесия в УНТ; а также блок схема программы расчета теоретических дифракционных картин рассеяния.

Наиболее интересной, с точки зрения оппонента, является третья глава. В ней представлены результаты построения атомных моделей и проведен расчет теоретических дифракционных картин рассеяния от УНТ различных конфигураций и структур на их основе, а также от некоторых углеродных материалов, образованных графеновыми сетками.

Диссертантом было установлено, что при проведении рентгенодифракционных исследований однослойных и многослойных УНТ по анализу интегральной интенсивности и ширине дифракционных максимумов можно оценить их радиус, а в случае ахиральных однослойных и многослойных УНТ - и их длину. В случае многослойных УНТ также можно определить число их слоев, а по расщеплению и смещению дифракционных максимумов представляется возможным определить и их хиральность в случае ахиральных УНТ. Также установлено, что наличие осцилляций на кривых распределения интерференционной функции рассеяния  $H(S)$  свидетельствует о том, что дифракционная картина получена от однослойной УНТ, а не от графена. По анализу частоты осцилляций на  $H(S)$  можно получить информацию о величине радиуса однослойной УНТ. Для многослойных УНТ наличие осцилляций на  $H(S)$  в направлении (001) свидетельствует о том, что дифракционная картина получена от УНТ типа «русская матрешка», а рост радиуса внутреннего слоя многослойной УНТ приводит к увеличению частоты осцилляций.

Проведенные построения кривых распределения интерференционной функции рассеяния для графита и графеновых сеток, различающихся по числу атомов, размерам, числу слоев и в случае моделирования различного рода искажений идеальных углеродных структур, также заслуживают внимания.

Глава четыре посвящена рентгенографическим исследованиям образцов углеродных материалов, полученных от ArryNano Inc. (Германия) и

CheapTubes Inc. (США), которые содержат нанотрубки и аттестованы производителями, т.е. данные образцы являются тестовыми.

Анализ дифракционных картин проводился С.В. Даниловым по методикам, разработанным в предыдущей главе. Фактически результаты, полученные при экспериментальном исследовании реальных образцов, должны были подтвердить или не подтвердить модели расчетных кривых распределения интерференционной функции рассеяния, предложенных диссертантом в предыдущей главе.

Проведенные исследования показали, что из данных рентгеновского эксперимента с учетом предложенных диссертантом методик построения атомных конфигураций УНТ и расчета соответствующих дифракционных картин от них, возможно с удовлетворительной точностью определить состав образца углеродного материала, содержащего нанотрубки.

Все вышеизложенное позволяет сделать вывод о высоком уровне результатов оппонируемой работы. Необходимо отметить, что для диссертационной работы Данилова С.В. характерно использование весьма широкого спектра современных методов исследования. В целом, в его работе получен большой объем расчетных данных и на их основе установлен целый ряд общих, ранее неизвестных, закономерностей. Полученные результаты могут внести существенный вклад при установлении реальной структуры УНТ по данным рентгеновского эксперимента.

Тем не менее, по содержанию и оформлению работы можно сделать несколько замечаний.

1. Без ущерба, можно было бы сократить первые параграфы литературного обзора.
2. При моделировании расчетных кривых распределения интерференционной функции рассеяния стоило бы учесть точность их определения из эксперимента.
3. В главе IV необходимо было бы поместить экспериментальные рентгенограммы для исследованных образцов, тем более что данная



глава называется «Результаты рентгенографических исследований образцов углеродных материалов, содержащих УНТ».

4. К сожалению, работа не свободна ни от орфографических опечаток, ни от неуместных в диссертации повторений некоторых сокращений, которые даны в начале диссертационной записки.

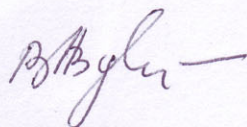
Данные замечания не снижают ценности предложенных диссертантом методик построения атомных конфигураций УНТ, расчета соответствующих дифракционных картин от них и полученных экспериментальных результатов.

Основные результаты диссертации хорошо апробированы. Они опубликованы в научных статьях и доложены на всероссийских и международных конференциях. Автореферат диссертации и опубликованные работы правильно и полно отражают содержание диссертационной работы.

Диссертация Данилова С.В. соответствует критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук. Данилов С.В. является сложившимся высококвалифицированным специалистом в области физики твердого тела и заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния.


Официальный оппонент  
кандидат физико-математических наук,  
доцент физического факультета МГУ  
имени М.В. Ломоносова

Авдюхина В.М.

 31.10.2013 г.

Декан физического факультета МГУ  
имени М.В. Ломоносова,  
доктор физ.-мат. наук, профессор



 Сысоев Н.Н.