

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации С.В. Данилова “Моделирование атомной структуры и рентгеноструктурный анализ углеродных нанотрубок”, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Работа посвящена исследованию углеродных материалов, содержащих нанотрубки и являющихся одними из наиболее перспективных веществ с широким спектром потенциальных применений, в том числе, в химии, производстве композиционных материалов и пр. В качестве основного метода исследования выбрана рентгеновская дифракция, позволяющая получить интегральные параметры углеродных материалов, без чего невозможно их практическое использование.

В представленной работе реализуется несколько логически последовательных этапов, от моделирования различных типов углеродных нанотрубок до расчета сложных систем по типу «механической смеси» со структурными искажениями, характерными для реальных материалов. В конечном итоге работа направлена на выработку методики определения параметров углеродных материалов путем сопоставления наборов теоретических рентгеновских спектров с экспериментальными данными. Несомненным достоинством исследования является выход на параметры углеродных материалов (диаметр и длина трубок), которые возможно сопоставить с другими методами исследования, в частности, электронной микроскопией и комбинационным рассеянием. Предлагаемый подход позволил получить как интегральные параметры продукта (идентификация и содержание фаз), так и индивидуальные характеристики наноразмерных углеродных образований (диаметр и длина нанотрубок, количество слоев и их дефектность), что представляет несомненный интерес именно для практических инновационных применений полученных знаний.

Весьма интересными представляются результаты по рентгенографическому исследованию углеродных материалов от различных производителей, с использованием методик, представленных в диссертационной работе. В частности, показано, что помимо заявленных производителями одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) в материалах присутствуют примеси многостенных нанотрубок (МУНТ) и даже графита. При этом ОУНТ радиуса 0.5-1.5 нм и МУНТ радиуса 5-10 нм с 8 слоями характеризуются различной степенью хиральности.

В целом, автором внесен определенный научный и научно-методический вклад в развитие направления, связанного с исследованиями наноразмерных углеродных объектов. Основные положения диссертации достаточно полно апробированы на конференциях и опубликованы, в том числе в российских реферируемых изданиях по профилю диссертации, включенных в список ВАК. В целом, представленная диссертационная работа является законченным научным исследованием и полностью удовлетворяет требованиям ВАК РФ, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Зав. лабораторией шунгитов

Федерального государственного бюджетного

учреждения науки Института геологии

Карельского научного центра Российской академии наук

к.ф.-м.н. (физика конденсированного состояния)

д.г.-м.н. (минералогия, кристаллография)



В.В.Ковалевский

Врио зам. директора
О.А. Повершинья
07.11.13

ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ