

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ  
БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ

**ИНСТИТУТ ХИМИИ И ТЕХНОЛОГИИ  
РЕДКИХ ЭЛЕМЕНТОВ И  
МИНЕРАЛЬНОГО СЫРЬЯ**

**им. И.В. Тананаева**

**КОЛЬСКОГО НАУЧНОГО ЦЕНТРА  
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК  
(ИХТРЕМС КНЦ РАН)**

Академгородок, 26а, Апатиты, Мурманская обл.  
Россия, 184209

Факс (815-55)6-16-58, тел (815-55) 79-5-49, 7-52-95

E-mail office@chemy.kolasc.net.ru

ОКПО 04694169, ИНН 5101100177, ОГРН 1025100508597

Ученому секретарю  
диссертационного совета

Д 212.190.06

доц. В. Б. Пикулеву

185910, Республика Карелия,

г. Петрозаводск,

пр. Ленина, 33,

Петрозаводский государственный  
университет

Исх.

№ 14642-2171 от 28.10.2013

На

№ \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_

### ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Данилова С. В. "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 Данилова С.В. "Моделирование атомной структуры и рентгеноструктурный анализ углеродных нанотрубок" направлена на решение одной из актуальных задач структурной диагностики углеродных наноматериалов, а именно, на совершенствование методов идентификации углеродных нанотрубок.

**Актуальность** работы не вызывает сомнения; достаточно отметить, что она вписывается в перечень Критических технологий РФ.

Диагностика реальных углеродных материалов, содержащих нанотрубки, является весьма сложной задачей в силу смешанного состава подобных материалов. Применение рентгенографических методов в данном случае позволяет, по крайней мере, в принципе, дать некую интегральную характеристику анализируемому объекту. И в этом смысле выбор метода рентгеновской дифракции является вполне обоснованным.

В то же время неоднозначность интерпретации дифракционных данных для указанных материалов порождает необходимость проведения исследовательских работ, направленных на предварительный анализ модельных наноуглеродных объектов с последующим применением полученных результатов к материалам смешанного состава. Эта задача поставлена в работе Данилова С.В. **Обоснование и формулировка проблемы сделаны корректно и убедительно.**

**Новизна и практическая ценность** работы определяется, с одной стороны, отсутствием систематических исследований указанной проблемы и, тем более, стандартизированных методик, а с другой стороны, наличием широкого спектра разрабатываемых, исследуемых и готовых товарных углеродных материалов, в том числе, содержащих нанотрубки.

**К достоинствам работы** соискателя следует также отнести ясность структуры автореферата, логичность формулировок, широту поставленной задачи, разработку собственного программного обеспечения - как для построения атомных моделей, так и для быстрого расчета теоретических дифракционных картин рассеяния, корректную интерпретацию результатов. В работе четко сформулированы возможности, обеспечиваемые разрабатываемым подходом, указаны параметры углеродных нанотрубок (УНТ), которые могут и не могут быть идентифицированы при рентгенографических исследованиях, что имеет особое значение для практического применения разрабатываемого метода идентификации параметров УНТ.

По работе можно высказать некоторые замечания:

- 1) Из автореферата не видно, было ли проведено сопоставление рентгеноструктурных методов анализа УНТ с другими методами исследования, анализ его достоинств и недостатков.

2) При анализе товарных продуктов фирм *ArrayNano Inc.* (Германия) и *CheapTubes Inc.* (США) не приведено обоснование для конечного варианта совокупности модельных структур, оптимальным образом описывающего экспериментальную интерференционную функцию  $H(S)$ . То есть, нет данных для других вариантов сочетания модельных структур или хотя бы упоминания об их существовании.

3) В работе приведены значения критерия недостоверности (R-фактора), но отсутствует их качественная характеристика, то есть, остается неясным, насколько хорошо модельная зависимость  $H(S)$  соответствует экспериментальному аналогу.

Приведенные замечания принципиально не затрагивают ценности полученных результатов.

В целом диссертационная работа Данилова С.В. оставляет на редкость благоприятное впечатление своей цельностью и систематичностью, прекрасным научным и методическим уровнем. Автореферат диссертации и опубликованные по ней материалы в полной мере отражают содержание работы.

Диссертация отвечает требованиям п.7 ВАК РФ "Положения о порядке присуждения ученых степеней", предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Данилов Сергей Владимирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Зав. лабораторией

высокотемпературной химии и электрохимии  
ИХТРЭМС, проф., д.х.н.

Ст. науч. сотр. ИХТРЭМС, к.х.н.

С.А. Кузнецов  
В.Г. Кременецкий

Подпись *Кузнецова С.А.*  
*Кременецкого В.Г.*

По месту работы удостоверяю:  
зав. канцелярией  
ИХТРЭМС КНЦ РАН  
*С. Орлова*

«18» *август* 20 13 г.

