

ОТЗЫВ

об автореферате диссертации Данилова Сергея Владимировича
"Моделирование атомной структуры и рентгеноструктурный анализ углеродных нанотрубок "

Диссертация С.В. Данилова посвящена актуальному и одновременно популярному направлению исследований объектов нанометрового масштаба. Особый интерес в мире вызывают углеродные материалы.

В работе, на основе компьютерного моделирования и рентгеноструктурного анализа некристаллических материалов разработаны критерии выявления типа конфигураций углеродных нанотрубок с широким спектром их характеристик, разработаны алгоритмы построения моделей нанотрубок различных конфигураций, алгоритм расчета дифракционных картин рассеяния с учетом большого числа атомов. Изучены осцилляции интенсивности рассеяния с параметрами однослойных и многослойных замкнутых углеродных нанотрубок.

Важным результатом работы являются рентгенографические исследования образцов углеродных материалов содержащих нанотрубки и графит. Сделана попытка анализа состава исследуемых объектов с помощью модельных интерференционных функций полученных из разных представлений о форме и характеристиках нанообъектов. Значительным техническим достижением диссертанта являются компьютерные прикладные программы построения моделей углеродных нанотрубок и методы расчет рентгеновской дифракционной картины.

Согласно представлениям химиков известны три основные кристаллические аллотропные формы углерода, обусловленные тремя его электронными состояниями (типы гибридизации валентных орбиталей) (см. например Хайманн Р.Б. Евсюков С.Е. Аллотропия углерода/ Природа 2003, №8). Разновидностей же структурных модификаций аморфного или слабоупорядоченного углерода в смешанных состояниях множество. Автор же во введении углеродные нанотрубки и фуллерены называет новыми аллотропными формами углерода в некристаллическом состоянии, что не корректно.

Во введении диссертант называет метод рентгеновской дифракции прямым методом исследования, что справедливо при определенных допущениях при изучении кристаллических структур, однако для аморфных или упорядоченных в наномасштабе объектов, к которым относятся углеродные нанотрубки, метод рентгеновской дифракции не является прямым, поскольку результат, и это хорошо показано в работе, зависит от модельных представлений и расчетов, выполненных исследователем, а также от статистических критериев согласия.

В разделе научной новизны записана вызывающая недоумение фраза: "по расщеплению и смещению максимумов можно определить хиральность МУНТ (только для ахиральных трубок)". В науке принято, что термин "хиральность" имеет качественный смысл, поэтому понятие "степени хиральности" требует подробного разъяснения.

Во введении критерием достоверности моделей было заявлено минимальное расхождение интерференционных картин $H(S)$ полученных для экспериментальных образцов и соответствующих им модельных объектов, но в четвертой экспериментальной главе выбран другой критерий на основе использования интенсивностей рассеянного излучения.

Работа в целом выполнена на высоком научно-методическом уровне и вполне отвечает требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Гл.науч.сотрудник ИГ Коми НЦ
УрО РАН, д.г.-м.н.

5 ноября 2013 г.



В.И.Ракин
Начальник общего отдела
Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института геологии Коми научного центра Уральского отделения Российской академии наук
25 ноября 2013 г.