

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 003.055.02 НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ИМ. Л. В. КИРЕНСКОГО СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК (ИФ СО РАН), ФАНО ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК.

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 04 марта 2016 года №3

О присуждении Лубковой Татьяне Александровне ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Механизм образования, диффузионные и адсорбционные свойства ряда углеродных наноструктур» по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния» принята к защите 25.12.2015 г., протокол № 7 диссертационным советом Д 003.055.02 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук (ИФ СО РАН), ФАНО, 660036, г. Красноярск, Академгородок 50, строение 38, приказ Минобрнауки №714/НК от 02.11.2012 г.

Соискатель Лубкова Татьяна Александровна 1986 г. рождения, в 2009 г. окончила Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Сибирский федеральный университет». В 2014 году соискатель освоила программу подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Сибирский государственный технологический университет» (ФГБОУ ВО «СибГТУ»). В настоящее время работает в должности эксперта в Обществе с ограниченной ответственностью «Экспертно-аналитический центр «Технологии труда».

Диссертация выполнена на кафедре физики факультета автоматизации и информационных технологий ФГБОУ ВО «СибГТУ».

Научный руководитель: к.ф.-м.н., Краснов Павел Олегович, доцент кафедры физики ФГБОУ ВО «СибГТУ».

Официальные оппоненты: Жандун Вячеслав Сергеевич, к.ф.-м.н. научный сотрудник лаборатории кристаллофизики ИФ СО РАН; Наслузов Владимир Алексеевич, д.х.н. главный научный сотрудник лаборатории молекулярной спектроскопии Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химии и химической технологии Сибирского отделения Российской академии наук, дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное научное учреждение «Технологический институт сверхтвёрдых и новых углеродных материалов» г. Троицк в своем положительном заключении, подписанном доктором физико-математических наук, заведующим лабораторией моделирования новых материалов П.Б. Сорокиным, указала, что впервые проведено систематическое исследование физико-математических особенностей процесса образования покрытия атомами переходных металлов поверхностей углеродных нанотрубок (УНТ), а также установлено, что вследствие малых значений энергии связывания и высоты потенциальных барьеров миграции атомов вдоль поверхности данное покрытие не может быть равномерным и однослойным.

Соискатель имеет 13 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 7 работ, из них 5, опубликованных в рецензируемых научных изданиях:

1. Fedorov A.S., Kovaleva E.A., Lubkova T.A., Popov Z.I., Kuzubov A.A., Visotin M.A., Irle, S. Molecular dynamical modelling of endohedral fullerenes formation in plasma // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – IOP Publishing, 2016. – V. 110. – №. 1. – P. 012078.
2. Кузубов, А.А. Теоретическое исследование процесса диссоциативной хемосорбции водорода на углеродных нанотрубках / А.А. Кузубов, М.Н. Попов, А.С. Федоров, Т.А. Кожевникова // ЖФХ – 2008. - Т. 82 № 12. – с. 2117 – 2121.
3. Кузубов, А.А. Моделирование и расчет физико-химических параметров процесса диффузии атомарного водорода на поверхности нанотрубок различного размера и хиральности / А.А. Кузубов, Р.П. Аврамов, М.А. Раимова, М.Н. Попов, Ю.М. Милютин, Т.А. Кожевникова, П.В. Артюшенко // ЖФХ – 2009. – Т. 83. – с. 753–757.
4. Кузубов, А.А. Расчет энергии связи комплексов титана и скандия с поверхностью углеродных нанотрубок / А.А. Кузубов, П.О. Краснов, Т.А.

Кожевникова, М.Н. Попов // Химическая физика. – 2009. – Т. 28, № 8. - с. 99–103. 5. Кузубов, А.А. Особенности декорирования углеродных нанотрубок атомами переходных металлов /А.А. Кузубов, П.О. Краснов, Т.А. Кожевникова, М.Н. Попов, П.В. Артюшенко // Химическая физика. –2011 –Т. 30, № 1, с. 89–93. Объем публикаций – 1.56 п.л.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы: *Ведущая организация*. Отзыв положительный. Замечания: 1. Следует отметить, что данное исследование проведено без учета вибрации и деформации самой нанотрубки, чье изменение структуры будет существенным при высокой температуре и высокой концентрации присоединенного водорода. 2. В диссертации не приведены результаты тестов выбранных теоретических приближений.

К.ф.м.н., Жандун В.С. – официальный оппонент. Отзыв положительный. Замечания: 1. Ряд полученных в работе результатов носит описательный характер, не проводится анализ физических величин, приводящих к данному результату. 2. При рассмотрении взаимодействия одиночного атома металла с углеродной нанотрубкой не ясна причина, по которой не рассматривалось расположение атома металла непосредственно над атомом углерода. 3. Не указывается, как рассчитывалась энергия равновесного состояния атома металла.

Д.х.н., Наслузов В.А. – официальный оппонент. Отзыв положительный. Замечания: 1. Утверждение о расхождении теории и эксперимента на 5-10% легковесно и требует указания на то какие объекты и их свойства имеются ввиду. 2. При обсуждении расчетов адсорбции и диффузии водорода на УТН не проводится данных о соответствии теории экспериментальным данным. 3. При обсуждении комплексов d-металлов на поверхности УТН адсорбированных по центру углеродных шестиугольников в качестве ключевого параметра используется расстояние от атома металла до поверхности. Более правильным было бы использование расстояний до ближайших атомов углерода.

Д.ф.м.н., г.н.с. отдела новых методов биологической химии ФГБУН Институт биохимической физики РАН Чернозатонский Л.А. Отзыв положительный. Критические замечания отсутствуют. *К.ф.м.н., доцент Университета штата Невада, Рино, США, С.А. Варганов*. Отзыв положительный. Критические

замечания отсутствуют. *К.х.н., доцент кафедры физической и неорганической химии Института цветных металлов и материаловедения СФУ Шубин А.А.* Отзыв положительный. Критические замечания отсутствуют.

Обзор отзывов. Среди важных полученных в диссертационной работе результатов, а также достоинств работы отмечены следующие: Тщательно продуманная концепция последовательности расчетов, позволяющая смоделировать сложные физико-химические процессы, такие как взаимодействие водорода с УНТ и их покрытие металлами. Подробный анализ результатов динамических расчетов, показывающий влияние атомов буферного газа на возможность формирования эндоэдральных металлофуллеренов (ЭМФ). Практическая ценность работы определяется возможностью использования выявленных в работе закономерностей для контролируемой целенаправленной химической модификации углеродных наноструктур.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обусловлен тем, что оппоненты и сотрудники ведущей организации являются ведущими, как в России, так и в мире специалистами в области физики конденсированного состояния, в частности теоретических исследований наноматериалов.

Диссертация посвящена теоретическому изучению процессов образования фуллеренов и эндоэдральных металлофуллеренов, а также исследованию диффузионных и адсорбционных свойств ряда углеродных нанотрубок.

В диссертации получены следующие основные результаты:

1. Было проведено моделирование возможности формирования фуллеренов и ЭМФ из димеров углерода C_2 в присутствии атомов скандия и буферного газа гелия в плазме при температурах 1500 и 2500 К. Выявлены факторы, влияющие на формирование фуллеренов и ЭМФ в данных условиях. Результаты квантово-химического моделирования подтверждают обоснованность механизма формирования фуллеренов и ЭМФ, предложенного группой К. Морокумы.
2. Установлена возможность формирования равномерного покрытия УНТ с различными индексами хиральности $(n,0)$ скандием и титаном. Для УНТ малого диаметра будет наблюдаться кластеризация атомов металла на их поверхности, а не образования равномерного слоя. Также показано, что атомы ванадия всегда

будут объединяться в кластеры на поверхности любых УНТ независимо от их диаметра, а палладий не способен образовывать правильную периодическую структуру на поверхности УНТ. 3. Выявлено влияние проводящих свойств, хиральности и диаметра УНТ на энергию связи и барьеры диффузии для атомов скандия и титана. 4. Исследованы системы, состоящие из атомов или молекул водорода на поверхности УНТ, а также исследованы возможности диссоциативной хемосорбции молекулы водорода на поверхности УНТ. Показано, что диссоциативная хемосорбция молекул H_2 на УНТ в отсутствии дополнительных условий (катализаторы, дефекты трубок и другие) является маловероятной. 5. Установлено, что процесс диффузии атомарного водорода по внутренней стороне УНТ протекает со значительной скоростью уже при 300 К, а на внешней - при повышении температуры до 600 К. Показано, что при повышении температуры диффузия атомов водорода приводит к их сближению с образованием молекул и дальнейшей десорбции с поверхности УНТ.

Теоретическая значимость работы определяется тем, что в ней впервые были проведены расчеты процесса образования фуллеренов и ЭМФ в плазме с учетом буферного газа и при наличии атомов металла в системе. Изучение взаимодействия УНТ с некоторыми d-металлами продемонстрировало возможность формирования УНТ, покрытых металлами.

Практическая значимость работы заключается в том, что результаты моделирования ЭМФ могут быть использованы при получении фуллеренов и их производных для оптимизации процесса получения. Также результаты работы показывают неэффективность использования равновесных и слабо неравновесных технологических процессов для применения УНТ в качестве аккумуляторов водорода.

Результаты диссертации могут быть использованы в организациях, специализирующихся на синтезе и исследовании углеродных наноструктурированных материалов для проведения теоретических и экспериментальных исследований новых наноструктур.

Оценка достоверности результатов исследования подтверждается тем, что в работе были использованы современные квантово-химические и молекулярно-

динамические методики расчетов на основе формализма функционала плотности, успешно апробированные во множестве работ, а также путем сравнения результатов геометрической и электронной структуры исследуемых объектов с результатами расчетов других авторов.

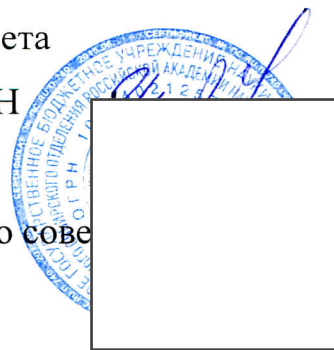
Личный вклад соискателя заключается в постановке целей и задач, их решении, планировании и непосредственном проведении квантово-химических расчетов, обобщении и интерпретации полученных результатов, подготовке научных статей.

На заседании 4 марта 2016 года диссертационный совет принял решение присудить Лубковой Татьяне Александровне ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 10 докторов физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния» и 9 по специальности 01.04.11 – «Физика магнитных явлений», участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени- 19, против присуждения учёной степени - 0, недействительных бюллетеней -0.

Председатель диссертационного совета
доктор физ.-мат. наук, академик РАН

Ученый секретарь диссертационного совета
доктор физ.-мат. наук



Шабанов В.Ф.

Втюрин А.Н.