

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по научной работе
ФГАОУ ВО "СПбПУ"

_____ Д.Ю. Райчук

2 марта 2015 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации — федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» (ФГАОУ ВО "СПбПУ") — на диссертационную работу Сиклицкой А.В. по теме: «Особенности трансформации наноалмазов при отжиге», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.10 («Физика полупроводников»).

1. Актуальность темы выполненной работы

Тема работы актуальна, поскольку относится к области применения методов вычислительной физики к таким объектам наноиндустрии как наноразмерные кластеры углерода, в том числе наноалмазы. Актуальность и практическая значимость работы согласуется со стратегией развития наноиндустрии в России (поручение Президента Российской Федерации В. В. Путина от 24 апреля 2007 г. № Пр-688).

Массивный алмаз является важным материалом, значение которого трудно переоценить в многочисленных применениях, начиная от иллюминаторов, прозрачных в широком спектральном диапазоне, и заканчивая био-медицинскими приложениями. Получение новых знаний о процессах зарождения и деградации алмаза при отжиге важно для отработки технологий синтеза массивных кристаллов. Математическое моделирование таких процессов открывает новые возможности оптимизации соответствующих технологий.

Спирально закрученные оболочечные нанокластеры углерода, получение которых в процессе отжига и рассматривается в диссертационной работе, могут

найти широкое применение в качестве адсорбентов, необходимых для решения задач водородной энергетики, адресной доставки лекарств и для улучшения полезных свойств аккумуляторов.

Результаты исследования, проведенного в диссертационной работе, свидетельствуют о возможности трансформации наноалмаза при отжиге в спирально закрученные углеродные графитоподобные наночастицы (спироиды), у которых внешняя оболочка не полностью замкнута, а шаг зависит от расстояния от центра спироида.

Все вышесказанное указывает на то, что тема данной диссертационной работы является актуальной.

2. Новизна выполненных исследований и полученных результатов работы состоит в том, что впервые:

- 1) Обнаружена трансформация наноалмазов в спироиды при температурном воздействии.
- 2) Развита метод количественного определения радиального упорядочения атомов внутри спироидов, позволяющий сравнивать различные типы углеродных графитоподобных наночастиц между собой.
- 3) Показано, что наноалмазы при отжиге способны трансформироваться в различного типа углеродные частицы, многие из которых являются переходными между наноразмерными кристаллами алмаза и идеальными сферическими оболочечными наноразмерными углеродными графитоподобными наночастицами.
- 4) Продемонстрировано, что разогрев наноразмерных кристаллов алмаза при поглощении фотонов ультрафиолетового диапазона в вакууме может оказаться перспективным для получения спиральных углеродных наночастиц в лабораторном эксперименте.
- 5) Систематизированы и обобщены литературные данные по спиральным углеродным наночастицам.
- 6) Выполнено сравнение результатов численного и лабораторного экспериментов.

3. Значимость полученных результатов для науки и производства

Результаты исследования могут оказаться полезны при разработке технологии получения углеродных спироидов в лабораторных экспериментах. Кроме того, исследование представляет ценность для понимания процессов, происходящих при обратимой трансформации наноалмаза в спиральные наночастицы. Полученные энергетические характеристики и закономерности образования спиральных углеродных наночастиц позволяют сделать качественные оценки энергий, необходимых для подобного синтеза.

4. Оценка содержания диссертационной работы

Все задачи, поставленные Сиклицкой Александрой Вадимовной в диссертационной работе, успешно решены. Однако, к ее содержанию и оформлению имеются следующие **критические замечания**.

- 1) Автор приводит данные по трансформации для наноалмаза, состоящего из 175 атомов, чтобы уменьшить время расчетов. Однако возникает вопрос о справедливости экстраполяции этих результатов для кластеров больших размеров.
- 2) В литературном обзоре отсутствуют данные о других известных закрученных формах нанокластеров углерода, таких как наноскроллы.
- 3) При применении метода Кар-Паринелло использовался термостат Ноэ, параметры которого не приводятся.
- 4) В тексте автореферата и диссертации имеются досадные опечатки. Так, например, в автореферате два следующих друг за другом рисунка, имеют один и тот же номер, 4.

Все отмеченные неточности не затрагивают сущностной части диссертации и поэтому носят второстепенный характер.

Таким образом, отмеченные недостатки не влияют на общую **положительную оценку работы**, которая представляет собой законченное научное исследование, содержащее решение актуальных задач физики полупроводников.

Диссертационная работа Сиклицкой А.В является обширным и логичным

научным исследованием трансформации наноалмаза в спироиды. Диссертация имеет логически связную структуру, материал изложен последовательно и четко. Основные выводы представляются достоверными и надежно обоснованными. Полученные численные результаты убедительно интерпретированы с точки зрения фундаментальных физических законов и явлений. Основные результаты диссертации докладывались на научных международных и всероссийских конференциях. Результаты диссертационного исследования опубликованы в ведущих зарубежных и отечественных научных журналах. Автореферат соответствует всем требованиям ВАК Минобрнауки РФ и полностью раскрывает содержание диссертации.

Диссертационная работа Сиклицкой Александры Вадимовны «Особенности трансформации наноалмазов при отжиге» соответствует требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям, представляемым к защите по специальности специальности 01.04.10 — «Физика полупроводников», а соискатель Сиклицкая Александра Вадимовна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Доклад Сиклицкой А.В, отражающий основные результаты диссертации, был заслушан на семинаре Центра перспективных исследований СПбПУ 20 января 2015 г. Работа получила положительную оценку участников семинара. На этом же семинаре был обсужден отзыв на диссертацию и автореферат, протокол №1.

Начальник отдела вычислительной физики сложных систем Центра перспективных исследований СПбПУ,
кандидат физико-математических наук

Быков Николай Юрьевич

195251, Санкт-Петербург, Политехническая, 29

Тел. 812 – 5349513

nbykov2006@yandex.ru

Н. Ю. Быков