ОТЗЫВ

научного руководителя о работе Аникиной Екатерины Владимировны над диссертацией «Компьютерное моделирование наноматериалов на основе углерода для применения в водородной энергетике», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Аникина Екатерина Владимировна, 1993 года рождения, в 2016 году окончила магистратуру в ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)» по направлению подготовки «03.04.01 Прикладные математика и физика». С 2020 года по настоящее время работает в ЮУрГУ (НИУ) (г. Челябинск). В 2016 году поступила в аспирантуру при кафедре компьютерного моделирования и нанотехнологий (ныне кафедра физики наноразмерных систем) Института естественных и точных наук ЮУрГУ (НИУ), направление 03.06.01, специальность 01.04.07 – физика конденсированного состояния. В период подготовки диссертации Е.В. Аникина проявила себя как способный и высококвалифицированный специалист в области компьютерного моделирования материалов.

Область научных интересов Екатерины Владимировны Аникиной связана с исследованием свойств низкоразмерных углеродных наноматериалов, перспективных для использования в водородных хранилищах. Этой тематикой она занимается с 2015 года, посвятив ей свою магистерскую работу. В процессе выполнения этой работы она углубила свои знания в области физики конденсированных фаз и наноразмерных систем, приобрела профессиональные навыки в методах компьютерного моделирования материалов и в их реализации на высокопроизводительной вычислительной технике. Это позволило ей в диссертационном исследовании поставить и решить достаточно сложную и громоздкую задачу расчета строения и свойств ряда низкоразмерных систем, в которых одновременно присутствуют и существенны взаимодействия разных энергетических масштабов – ковалентные, ионные и ван-дер-ваальсовы. Конкретно, была продемонстрирована возможность управления сорбционными свойствами углеродных наноструктур по отношению к водороду путем создания на их поверхностях активных центров адсорбции из атомов металлов. Получена картина физического взаимодействия молекулярного водорода с декорированными углеродными наноструктурами, обладающими предельными значениями удельной поверхности: квази-1D структурами - углеродными нанотрубками (УНТ), 1D структурами – карбинами, 2D-структурами – графеном и его производными. Практический интерес представляют результаты оценки водородной емкости рассмотренных структур, особенно структур, имеющих емкость вблизи и выше границы «коммерческой привлекательности» для материалов водородных хранилищ, устанавливаемых на транспортных средствах. При поиске новых материалов за пределами семейства, рассмотренного в работе, практическую ценность

представляет также разработанная в диссертации методика первопринципного моделирования, использующая все или почти все возможности для повышения надежности и точности результатов, доступные для использованных в работе программных пакетов.

Диссертация содержит ряд новых результатов, которые необходимо учитывать при поиске методами компьютерного моделирования материалов, перспективных для хранения водорода. Именно, впервые изучено влияние размерных эффектов на энергетические и структурные характеристики водородных комплексов на декорированных литием углеродных нанотрубках (на внутренней и внешней поверхностях). Впервые исследовано поведение водородных комплексов на карбине, декорированном литием, графдиине, декорированным никелем, и енине с адатомами щелочных и щелочноземельных металлов (Na, K, Ca), получены оценки водородных емкостей и температур десорбции. Результаты научной работы были доложены и обсуждены на различных всероссийских и международных конференциях, полно и своевременно опубликованы в рецензируемых периодических изданиях.

В целом Е.В. Аникину можно охарактеризовать как сформировавшегося научного работника, способного ставить и решать научные проблемы, отвечающие квалификации кандидата физико-математических наук.

Диссертация Аникиной Е.В. «Компьютерное моделирование наноматериалов на основе углерода для применения в водородной энергетике» отвечает всем требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» ВАК РФ, предъявляемых к кандидатским диссертациям, а ее автор, Аникина Екатерина Владимировна, заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Научный руководитель /Бескачко В.П./
Дата: 14.10.2020

Бескачко Валерий Петрович
доктор физико-математических наук, 02.00.04 – физическая химия, доцент,
профессор кафедры физики наноразмерных систем
Физический факультет
Институт естественных и точных наук
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)».
Контактные данные:
Тел.: 8(351)2679023;
почтовый адрес: 454080, г. Челябинск, пр. Ленина д. 76, ауд. 245
эл. почта: beskachkovp@susu.ru

Управление по работе с кадрами

Подпись Бескачко удостоверяю
Начальник управления по работе с кадрами Н.С. Минакова