

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 212.298.04, СОЗДАННОГО
НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО АВТОНОМНОГО
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «ЮЖНО-
УРАЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ (НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ)» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ПО ДИССЕРТАЦИИ
НА СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 26.05.2021 № 33

О присуждении Аникиной Екатерине Владимировне, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Компьютерное моделирование наноматериалов на основе углерода для применения в водородной энергетике» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния принята к защите 22 марта 2021 г., протокол заседания №33П, диссертационным советом Д 212.298.04, созданным на базе федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, приказ № 105/нк от 11.04.2012.

Соискатель Аникина Екатерина Владимировна, 1993 года рождения, в 2016 году окончила с отличием магистратуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Южно-Уральский государственный университет» (национальный исследовательский университет) по направлению «Прикладные математика и физика».

С 1 сентября 2016 г. по 31 августа 2020 г. обучалась в очной аспирантуре федерального государственного автономного образовательного учреждения

высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)». В настоящее время работает ассистентом на кафедре физики наноразмерных систем ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», Министерство науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре физики наноразмерных систем в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)», Министерство науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, доцент Бескачко Валерий Петрович, профессор кафедры физики наноразмерных систем, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)».

Официальные оппоненты:

Тюрин Юрий Иванович, доктор физико-математических наук, профессор, профессор отделения экспериментальной физики Инженерной школы ядерных технологий, ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», г. Томск;

Беленков Евгений Анатольевич, доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры физики конденсированного состояния, ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет», г. Челябинск

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук (ИМЕТ УрО РАН), г. Екатеринбург, в своем положительном отзыве, подписанном Владимиром Александровичем Крашаниным, кандидатом физико-математических наук, заведующим лабораторией

порошковых и композиционных материалов и утвержденном директором, академиком РАН, доктором физико-математических наук, профессором Ремпелем Андреем Андреевичем, указала, что диссертационная работа Аникиной Е.В. является законченной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение задачи – поиска материалов для твердотельных хранилищ водорода методами первопринципного компьютерного моделирования, имеющей значение для развития вычислительных методов физики конденсированного состояния. Работа в полной мере соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Соискатель имеет 18 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 17 работ, из них в рецензируемых научных изданиях, входящих в перечень ВАК, опубликовано 7 работ (4 из них опубликованы в журналах, индексируемых Scopus и Web of Science).

Статьи, опубликованные в изданиях из определенного ВАК Перечня рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата и доктора наук, а также статьи, опубликованные в изданиях, входящих в международные базы данных и системы цитирования:

1. Li-functionalized Carbon Nanotubes for Hydrogen Storage: Importance of Size Effects / E.V. Anikina, A. Banerjee, V.P. Beskachko, R. Ahuja // ACS Applied Nano Materials. – 2019. – V. 5, Iss. 2. – P. 3021-3030. (авторская доля соискателя: 5 с. из 10 с.).

2. Li-decorated carbyne for hydrogen storage: charge induced polarization and van't Hoff hydrogen desorption temperature / E.V. Anikina, A. Banerjee,

V.P. Beskachko, R. Ahuja // *Sustainable Energy & Fuels*. – 2020. – V. 4. – P. 691-699. (авторская доля соискателя: 6 с. из 9 с.).

3. Influence of Kubas-type interaction of B–Ni codoped graphdiyne with hydrogen molecules on desorption temperature and storage efficiency / E.V. Anikina, A. Banerjee, V.P. Beskachko, R. Ahuja // *Materials Today Energy*. – 2020. – V. 16. – P. 100421. (авторская доля соискателя: 5 с. из 9 с.).

4. Tuning Hydrogen Storage Properties of Carbon Ene–Yne Nanosheets through Selected Foreign Metal Functionalization / E.V. Anikina, T. Hussain, V.P. Beskachko, H. Bae *et al.* // *Journal of Physical Chemistry C*. – 2020. – V. 124, Iss. 31. – P. 16827-16837. (авторская доля соискателя: 7 с. из 11 с.).

5. Аникина, Е.В. Ab initio studies of hydrogen physisorption on clear and Li-doped carbon nanotubes / Е.В. Аникина, В.П. Бескачко // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика»*. – 2017. – Т. 9, № 2. – С. 64-71. (авторская доля соискателя: 5 с. из 8 с.).

6. Аникина, Е.В. Importance of Atomic-Like Basis Set Optimization for DFT Modelling of Nanomaterials / Е.В. Аникина, И.А. Балякин, В.П. Бескачко // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика»*. – 2019. – Т. 11, № 2. – С. 44–50. (авторская доля соискателя: 4 с. из 7 с.).

7. Аникина, Е.В. Basis Set Superposition Error: Effects of Atomic Basis Set Optimization on Value of Counterpoise Correction / Е.В. Аникина, В.П. Бескачко // *Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика»*. – 2020. – Т. 12, № 1. – С. 55–62. (авторская доля соискателя: 6 с. из 8 с.).

На диссертацию и автореферат поступили положительные отзывы от следующих ученых:

1. Сыртанов М.С., кандидат технических наук, доцент отделения экспериментальной физики Инженерной школы ядерных технологий ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский политехнический университет». Замечания и вопросы: 1) Чем обусловлена разница в значениях энергии связи, представленных на рисунке 2, при моделировании с использованием приближений LDA и GGA? 2) Неубедительным является

утверждение в выводе 5 о том, что декорирование никелем позволяет получить температуру десорбции 300-400 К при атмосферном давлении. Необходимо уточнить на основании каких данных было сделано указанное заключение.

2. Зацепин А.Ф., кандидат технических наук, доцент, руководитель научной лаборатории «Физика функциональных материалов углеродной микро- и оптоэлектроники», профессор кафедры физических методов и приборов контроля качества Физико-технологического института ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина». Замечания и вопросы: 1) Автором обсуждается возможность практического использования карбина, декорированного литием. Расчеты предсказывают, что наибольший интерес, с точки зрения стабильности представляет карбин типа LiC_6 . В связи с этим было бы полезно уточнить: существует ли возможность обеспечения стабильности декорированного карбина с повышенной концентрацией Li при сохранении цепочечной структуры без её кластеризации? 2) Из текста реферата неясна методика прогнозирования водородной емкости изучаемых наноматериалов. Учитывалось ли возможное влияние на водородную емкость неизбежных неоднородностей и дефектов материалов?

3. Бурмистров В.А., доктор физико-математических наук, профессор кафедры химии твердого тела и нанопроцессов ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет». Без замечаний.

4. Баранов Н.В., доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник Института физики металлов имени М.Н. Михеева УрО РАН. Замечание: в автореферате не уделено внимания сравнению полученных результатов с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

5. Волков Н.Б., доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, главный научный сотрудник лаборатории нелинейной динамики ФГБУН «Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук». Без замечаний.

6. Коренченко А.Е., доктор физико-математических наук, профессор кафедры высшей математики Института комплексной безопасности и специального приборостроения МИРЭА. Замечания и вопросы:

1) Отличия результатов вычисления энергии связи молекулы H_2 , полученных в приближениях обобщенных градиентов (CGA) и локальной плотности (LDA) велики и могут составлять более 90% (для чистых углеродных нанотрубок), что намного превышает заявленные погрешности. С чем связаны эти расхождения и есть ли экспериментальные данные, позволяющие предпочесть одно из приближений другому? 2) Остается неясным механизм сорбции водорода на атомах металлов. Для ван-дер-ваальсовой связи энергия связи кажется слишком большой. Можно ли уточнить, как перераспределяется заряд между атомами металла и водорода?

7. Акашев Л.А., кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ФГБУН Института химии твердого тела Уральского отделения РАН. Замечания и вопросы: почему в работе исследовались низкоразмерные углеродные структуры, декорированные литием, натрием, калием, магнием, кальцием и никелем, а не другими элементами?

8. Галашев А.Е., доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник лаборатории электродных процессов ФГБУН Института высокотемпературной электрохимии УрО РАН. Без замечаний.

Выбор официальных оппонентов обосновывается наличием у оппонентов публикаций по проблемам диссертационного исследования, высоким уровнем компетентности в исследованиях и способностью определить научную практическую ценность диссертации. Выбор ведущей организации обосновывается наличием компетентных специалистов, а также тем, что одно из основных направлений научно-исследовательской деятельности соответствует тематике диссертации Аникиной Екатерины Владимировны, что подтверждается публикациями.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований: **разработана** методика проведения

компьютерного моделирования слабосвязанных систем (чистых и декорированных атомами металлов низкоразмерных углеродных материалов с молекулярным водородом), позволяющая получать согласованные результаты в программных пакетах с разной реализацией метода теории функционала плотности; **предложен** способ модификации поверхности углеродных наноматериалов – декорирование легкими металлами, позволяющий, с одной стороны, избежать образования зародышей объёмной фазы металла, а с другой – усилить связь молекул водорода с сорбентом, что улучшает термодинамические условия для ведения процессов сорбции/десорбции H_2 ; **предложен** способ управления взаимодействием переходных металлов с углеродными материалами путём легирования исходной углеродной структуры электронно-дефицитными примесями, в частности, бором.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что: **доказана** необходимость оптимизации базиса атомноподобных орбиталей для каждой рассматриваемой структуры и учёта поправки, компенсирующей ошибку суперпозиции базисных наборов, для получения точных и согласованных результатов расчёта энергий связи водорода с наноразмерными углеродными материалами в разных реализациях метода функционала электронной плотности; **продемонстрирована** возможность управления характеристиками сорбции водорода на углеродных структурах путем декорирования последних атомами металлов; **получена** картина взаимодействия молекулярного водорода с чистыми и декорированными углеродными наноматериалами.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что: **получены** оценки водородной ёмкости и термодинамических параметров сорбции водорода (температуры десорбции), позволяющие обосновать целесообразность экспериментального синтеза материалов; **разработана** методика первопринципного моделирования, которая может быть использована при исследовании новых слабосвязанных систем за пределами рассмотренного семейства материалов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что: используемая **теория** функционала электронной плотности адекватно описывает строение и свойства углеродных систем пониженной размерности и их взаимодействие с адсорбированными атомами; **использованы** тщательно протестированные программные пакеты SIESTA и VASP; для каждой исследованной системы **проведены** предварительные численные эксперименты и **определены** параметры моделирования, обеспечивающие необходимую точность расчетов; **установлено** согласие результатов, представленных в диссертации, с имеющимися в литературных источниках экспериментальными и теоретическими исследованиями.

Личный вклад соискателя состоит в том, что соискателем разработана методика определения параметров моделирования, повышающая точность и согласованность результатов расчета параметров физической сорбции водорода на чистых и декорированных углеродных наноматериалах, получены результаты первопринципного моделирования сорбционных процессов. Вклад соискателя был также основным при анализе и подготовке к публикации полученных результатов и существенным на стадии выдвижения и постановки задач.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается наличием последовательного плана исследования, основной идейной линии, и соответствия выводов цели работы. По своему содержанию диссертация отвечает паспорту специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния в пунктах 1 и 5.

Диссертационный совет пришел к выводу о том, что диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой содержится научно обоснованное решение научных задач, важных для развития физики конденсированного состояния в областях, связанных с исследованием адсорбционных свойств наноструктурированных углеродных материалов, со способами целенаправленного управления этими

свойствами и с совершенствованием вычислительных методов их предсказания. В целом диссертация отвечает квалификационным требованиям, установленным в п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор, Аникина Екатерина Владимировна, заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

На заседании 26 мая 2021 г. диссертационный совет принял решение присудить Аникиной Екатерине Владимировне ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 26 человек, из них 4 доктора наук по научной специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 32 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 25, против «нет», недействительных бюллетеней 1.

Заместитель председателя диссертационного совета

С.Ю. Гуревич

Ученый секретарь диссертационного совета

С.И. Морозов

Дата оформления заключения «26» мая 2021 г.

