

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Аникиной Екатерины Владимировны
“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

Водородная тематика в России начала развиваться еще с 2010 года, а с 2018 года она стремительно набирает обороты. Россия активно ведет разработки в сфере водородной энергетике. Планируется создание в России к 2024 году промышленного производства водорода без выбросов углекислого газа, это так называемый экологически чистый "зеленый" водород, разработка, изготовление и испытание газовых турбин на метан-водородном топливе, осуществление разработки энергоэффективных технологий получения, транспортировки и хранения водорода. Одной из серьезных проблем водородных технологий является создание емких, компактных и безопасных хранилищ водорода. Наиболее перспективными в этом отношении являются твердотельные хранилища с удержанием водорода за счет физической адсорбции. Адсорбент должен обладать достаточной водородной емкостью, умеренными термодинамическими условиями для сорбции/десорбции водорода и хорошей многоциклового стойкостью. Для обеспечения благоприятных условий протекания циклических процессов адсорбции/десорбции водорода энергия связи должна находиться в диапазоне 200-600 мЭВ.

Углеродные наноматериалы давно привлекают внимание исследователей водородных хранилищ из-за малой плотности, высокой удельной поверхности, пористости, механической устойчивости и дешевизны производства. В связи с этим, представленная работа и поставленные в ней задачи несомненно актуальны.

Научная ценность диссертации Аникиной Е.В. заключается в том, что она впервые исследовала поведение водородных комплексов на углеродных нанотрубках и карбина, декорированных литием, на графдине, декорированном никелем, и егине с адатомами металлов (Na, K, Ca), получены оценки водородных емкостей и температур десорбции. В результате компьютерного моделирования наноматериалов на основе углерода для применения в водородной энергетике установлено, что перспективными материалами для водородных хранилищ являются материалы на основе низкоразмерных углеродных структур, декорированных литием, кальцием и никелем.

Результаты диссертации Аникиной Е.В. неоднократно докладывались на Всероссийских и международных конференциях и семинарах по физике конденсированного состояния.

Аникина Е.В. опубликовала 17 научных работ, в том числе три публикации в рецензируемых научных изданиях и журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ, четыре - в изданиях, входящих в системы цитирования Scopus и Web of Science.

Аникина Е.В. выполнила большой объем вычислительных работ и получила важные результаты, имеющие научное и практическое значение.

Полученные результаты соответствуют поставленным целям и задачам, их достоверность не вызывает сомнений.

Наряду с отмеченными и другими положительными сторонами работы Аникиной Е.В., при ознакомлении с авторефератом возник вопрос:

1. Почему в работе исследовались низкоразмерные углеродные структуры, декорированные литием, натрием, калием, магнием, кальцием и никелем, а не другими элементами?

Указанный выше вопрос носит частный характер и не снижает общей положительной оценки работы.

Проведенные автором глубокие систематические исследования носят законченный характер, соответствуют уровню кандидатской диссертации.

Оценивая автореферат диссертации Аникиной Екатерины Владимировны, считаю, что диссертация удовлетворяет требованиям п.9 "Положения о порядке присуждения ученых степеней", а ее автор Аникина Е.В. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Кандидат физико-математических наук,
по специальности 02.00.04 - физическая химия,
ведущий научный сотрудник
ФГБУН Института химии твердого тела
Уральского отделения РАН

Ans

Акашев Л.А.

14.05.2021г.

Я, Акашев Лев Александрович, согласен на обработку персональных данных.
620990 г.Екатеринбург, ул.Первомайская, 91: тел. (343) 362-33-52
akashev-ihim@mail.ru

Подпись Акашева Л.А. заверяю:

Ученый секретарь Института химии твердого тела УрО РАН,
кандидат химических наук

1033

Богданова Е.А.