

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

Диссертационная работа Е. В. Аникиной посвящена исследованию механизмов сорбции водорода на углеродных структурах с пониженной размерностью и высокой удельной поверхностью методами компьютерного моделирования. Несмотря на то что история исследований и поиска эффективных технологий и материалов для хранения и транспортировки водорода насчитывает уже несколько десятилетий, в последние годы в связи с экологическими проблемами наблюдается повышенный интерес к этим вопросам, особенно к разработке технологий, в которых в качестве хранилищ водорода предполагается использование твердотельных низкоразмерных структур из-за их сорбционных и механических характеристик. В связи с этим тема диссертационной работы Е. В. Аникиной представляется без сомнения актуальной.

Автором выполнен анализ различных углеродных структур с точки зрения их потенциальных возможностей для хранения водорода и показана возможность их модификации путем создания активных центров адсорбции путем их декорирования атомами щелочных металлов, а также никелем. Для декорированных углеродных структур получены оценки вероятности кластеризации адатомов в зависимости от их сорта, а также исследовано влияние геометрии адсорбирующей поверхности на энергию связи водорода. Показано, что материалы на основе низкоразмерных углеродных структур, декорированных литием, кальцием и никелем могут являться перспективными для хранения водорода. Исследование выполнено с использованием современных методов расчета и апробированных программных пакетов и подкреплено численными экспериментами. В работе должное внимание уделено вопросам точности и согласованности расчетов, что обеспечивает достаточную достоверность полученных результатов.

К сожалению, в автореферате не уделено внимания сравнению полученных результатов с имеющимися в литературе экспериментальными данными.

Результаты, полученные Е. В. Аникиной, прошли достаточную апробацию, были представлены на конференциях различного уровня и опубликованы в 7-х статьях в отечественных и зарубежных изданиях, в том числе, включенных в перечень ВАК. Считаю, что диссертация Аникиной Екатерины Владимировны «Компьютерное моделирование наноматериалов на основе углерода для применения в водородной энергетике» удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Согласен на обработку персональных данных.

Главный научный сотрудник
Института физики металлов имени
М.Н. Михеева Уро РАН,
доктор физ.-мат. наук, профессор
620108, г. Екатеринбург,
ул. С. Ковалевской 18,
e-mail: baranov@imp.uran.ru
тел. (343) 3783732



Н. В. Баранов

