

ОТЗЫВ

На автореферат диссертации Аникиной Екатерины Владимировны
**«Компьютерное моделирование наноматериалов на основе углерода для
применения в водородной энергетике»**, представленную на соискание

ученой степени

кандидата физико-математических наук

по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Наноматериалы имеют высокое отношение поверхности к объему и могут быть консолидированы, что является важным для их использования в качестве устройств хранения водорода. Углеродные нанотрубки, гидриды на основе наномagnesия, сложные гидридные / углеродные нанокомпозиты, нанотрубки из нитрида бора, полимерные нанокомпозиты и металлоорганические каркасы относятся к потенциальным кандидатам для хранения водорода. Для эффективного использования определенных физических и химических эффектов, связанных с наноразмером, необходимо проведение всесторонних исследований, в том числе компьютерного моделирования. Диссертационная работа Аникиной Е.В. посвящена исследованию адсорбции водорода на низкоразмерных углеродных структурах методами компьютерного моделирования. Нахождение наноструктурированных материалов, пригодных для хранения водорода, является главной целью работы.

Актуальность темы исследования определяют привлекательные энергетические характеристики водорода. Водород рассматривается как новый вариант возобновляемой и чистой энергии, он удобен и безопасен. Водород - идеальное топливо будущего, а его использование в топливном элементе позволяет напрямую преобразовывать химическую энергию водорода в воду, электричество и тепло.

Новизна работы проявляется в изучении размерных эффектов на энергетические и структурные характеристики исследуемых систем, в понимании фундаментального механистического поведения материалов с участием катализаторов и их физико-химической реакции с водородом в атомарном масштабе.

По результатам DFT расчетов было установлено, что материалы на основе низкоразмерных углеродных структур, декорированных литием, кальцием и никелем, являются перспективными для хранения водорода. Определены их водородные емкости, проведена оценка температур десорбции. Обсуждаются синергические эффекты легирования углеродного каркаса бором.

Согласно представленному автореферату диссертация Е.В. Аникиной соответствует специальности 01.04.07 – Физика конденсированного

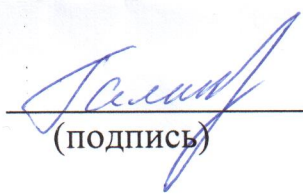
состояния, по своему научному и методическому уровню, объему и важности полученных результатов диссертационная работа Е.В. Аникиной удовлетворяет требованиям Положения о присуждении ученых степеней, а ее автор заслуживает присуждения искомой степени.

Главный научный сотрудник
лаборатории электродных процессов ФГБУН
Института высокотемпературной электрохимии УрО РАН
доктор физ.-мат. наук,
по специальности Теплофизика и молекулярная физика

Александр Евгеньевич Галашев

Я, Галашев А.Е., согласен на обработку персональных данных.

Адрес организации: ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии
Уральского отделения РАН, г. Екатеринбург, 620990, ул. Академическая, 20.
Тел.: +7 (343) 374-50-89, Факс: +7 (343) 374-59-92, E-mail: info@ihite.uran.ru

 / Галашев А.Е. / « 13 » мая 2021 г.
(подпись) (Ф.И.О)

(печать)

Подпись главного научного сотрудника, д.ф.-м.н. А.Е. Галашева заверяю
Ученый секретарь ФГБУН ИВТЭ УрО РАН
к.х.н. Козинцева А.О.

