

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

Диссертация Аникиной Е.В. посвящена исследованию сорбционных свойств (по отношению к водороду) низкоразмерных материалов на основе углерода с помощью методов компьютерного моделирования. Актуальность данного исследования непосредственно связана с современным трендом исследования экологически чистых источников энергии и способов транспортировки этой энергии. Водородная энергетика при должном развитии инфраструктуры может стать эффективным и экологичным решением. Одним из технологических вопросов, поиском возможного материала для мобильных водородных хранилищ, и занималась Екатерина Владимировна в своей работе. Диссертант выбрал подход компьютерного моделирования, который может эффективно сократить затраты на постановку эксперимента при поиске материала с необходимыми свойствами. Рекомендации по материалам, данные в диссертации и основанные на оценках измеримых в экспериментах параметров (например, водородной емкости или температуры десорбции), представляют практическую ценность, особенно для случаев, когда эти оценки попадают в интервал значений, необходимый для эффективного практического применения водородных хранилищ.

Ряд декорированных структур был исследован автором впервые (графдиин с никелем, енин с щелочными и щелочноземельными металлами, карбин с литием), для нанотрубок впервые было проведено комплексное и систематическое исследование с изучением влияния размерных эффектов на сорбционные комплексы, что подтверждает научную новизну диссертационной работы. Обоснованность результатов обеспечивается использованием метода (функционал электронной плотности), подходящего для моделирования процессов сорбции и реализованного в тщательно протестированных программных пакетах VASP и SIESTA; педантичным процессом предварительных расчетов для каждой из рассмотренных систем, который обеспечивает хорошую точность вычислений для слабосвязанных систем; а также близостью с имеющимися экспериментальными и теоретическими результатами других исследователей.

К тексту автореферата имеются следующие замечания.

1) Как видно из табл. 2, отличия результатов вычисления энергии связи молекулы H₂, 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 (табл. 1). Хотелось бы уточнить, 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 ванндер-ваальсовой связи энергия связи кажется слишком большой. Можно ли уточнить, как перераспределяется заряд между атомами металла и водорода.

Несмотря на отмеченные недостатки, работа Аникиной Е.В. хорошо структурирована, защищаемые положения обоснованы, полученные диссидентом результаты представляют научную и практическую ценность. Таким образом, диссертационная работа Аникиной Екатерины Владимировны «Компьютерное моделирование наноматериалов на основе углерода для применения в водородной энергетике» удовлетворяет требованиям пункта II, подпунктов 9-14 Положения о порядке присуждения ученых степеней, предъявляемых к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Согласна на обработку персональных данных.

Доктор физико-математических наук
(специальность 02.00.04 Физическая химия),
профессор кафедры высшей математики Института
комплексной безопасности и специального
приборостроения МИРЭА

107076, г. Москва, Строгинка, 20
тел.: +7 (499) 215-65-65 доб. 2110
e-mail: korenchenko@mirea.ru

Коренченко Анна Евгеньевна
14.05.2021

Подпись Коренченко А.Е. заверяю

