

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

На сегодняшний день основу современного энергетического комплекса России в большей степени составляют тепловые энергетические станции, которые ежегодно выбрасывают в атмосферу миллионы тонн вредных веществ, что не может не сказаться на качестве жизни населения страны. Использование альтернативного энергетического сырья в повседневной жизни позволяет решить экологические проблемы, которые обсуждаются на международных саммитах лидерами ведущих стран мира. Выбор водорода в качестве альтернативного источника энергии обладает рядом преимуществ: возобновляемость запасов, экологическая безопасность и большая энергоемкость. Основные мировые сообщества рекомендуют накапливать и хранить водород в накопителях на основе различных материалов, в частности, в наноматериалах на основе углерода. Компьютерное моделирование является важнейшим инструментом при разработке эффективных материалов-накопителей водорода, особенно с экономической точки зрения. В связи с этим, работа Аникиной Е.В., посвященная расчетным исследованиям углеродных наноматериалов с целью создания материалов-накопителей с высокой емкостью по водороду, хорошей цикличностью, а также приемлемыми условиями (температура и давление) сорбции/десорбции водорода, представляет самостоятельный научный интерес в области физики конденсированного состояния, а также имеет важное практическое значение.

В диссертационной работе Екатерина Владимировна решила ряд важнейших задач, связанных с адсорбцией водорода на низкоразмерных углеродных материалах (углеродные нанотрубки, карбин, графидин, енин), декорированных примесными атомами металлов (Li, Ni, Na, K, Ca). Моделирование указанных систем проводилось автором с использованием метода теории функционала плотности (DFT) в программных пакетах SIESTA и VASP, активно используемых при вычислении свойств структур в физике твердого тела. На основе полученных результатов автор продемонстрировал и обосновал возможность управления сорбционными свойствами углеродных наноструктур по отношению к водороду путем создания на их поверхностях активных центров адсорбции атомами металлов. Также диссертантом была получена картина физического взаимодействия молекулярного водорода с декорированными углеродными наноструктурами. Необходимо отметить, что комплексный подход к исследованию адсорбции водорода на чистых и декорированных материалах, а также оценка энергии адсорбции, водородной емкости и температуры десорбции, позволили автору разработать рекомендации по выбору наиболее перспективных материалов на основе низкоразмерных углеродных структур для водородных хранилищ. С фундаментальной точки зрения полученные в работе результаты вносят значительный вклад в понимание закономерностей взаимодействия водорода с углеродными наноматериалами низкой размерности.

Исходя из текста автореферата имеются вопросы, требующие разъяснения.

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.

Указанные замечания не снижают общей ценности диссертационной работы.

В целом работа Аникиной Е.В. производит положительное впечатление, безусловно является актуальной, содержит новые научные результаты и представляет интерес для практического применения. Достоверность основных выводов работы и положений, выносимых на защиту, не вызывает сомнений и достигается за счет грамотно проведенного моделирования, анализа полученных результатов, большого объема данных, а также апробации на многочисленных российских и международных конференциях. Основные результаты работы опубликованы в 17 печатных работах, в том числе в 3 статьях в журналах, рекомендованных ВАК, и в 4 статьях в журналах, входящих в системы цитирования Scopus и Web of Science. На основании изложенного считаю, что представленная работа полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а Аникина Екатерина Владимировна заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Даю свое согласие на обработку персональных данных.

Кандидат технических наук (специальность
05.11.13 Приборы и методы контроля природной
среды, веществ, материалов и изделий),
доцент отделения экспериментальной физики
Инженерной школы ядерных технологий ФГАОУ
ВО «Национальный исследовательский
Томский политехнический университет»


Сыртанов Максим Сергеевич
22.04.2021

634050, г. Томск, пр. Ленина, 30
тел.: +7 (3822) 701777 (доб. 1542)
e-mail: mss12@tpu.ru

Подпись Сыртанова М.С. заверяю
И.о. Ученого секретаря ФГАОУ ВО «Национальный
исследовательский Томский политехнический
университет», к.т.н.



Кулинич Екатерина Александровна
22.04.2021