

## 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

По существующим прогнозам водородная энергетика может стать экологически безопасной альтернативой углеводородному топливу и помочь решить проблему с истощающимися ископаемыми источниками энергии. Однако, текущее состояние дел в этой области еще далеко от их завершения - создания полного энергетического цикла, основанного на водородном топливе. Одной из технологических проблем является создание мобильных хранилищ для водорода, пригодных для применения на транспортных средствах и способных конкурировать по эффективности и безопасности с уже существующими технологическими решениями. Углеродные наноматериалы из-за своей пористости, легкости и относительной дешевизны производства уже давно привлекают интерес исследователей как адсорбенты молекулярного водорода. Более того, существование множества низкоразмерных аллотропных форм углерода позволяет подбирать материалы с экстремальной удельной поверхностью и, одновременно, низкой плотностью. Однако, чистые углеродные наноматериалы слабо связывают молекулярный водород, что приводит к слишком низким температурам десорбции (порядка температуры кипения жидкого азота), в то время как для эффективных циклов сорбции/десорбции водородного топлива необходимо обеспечить температуры порядка 300 К. Из-за огромного числа возможных углеродных структур-основ и способов модификации их поверхности для усиления связи водород-матрица затраты на экспериментальный перебор вариантов могут быть внушительными и не гарантирующими успешный результат. *Поэтому исследование возможных структур для водородных хранилищ при помощи компьютерного моделирования с оценкой их сорбционных свойств, несомненно, является актуальной задачей физики конденсированного состояния.*

В представленной работе исследуется ряд низкоразмерных (одномерных и двумерных) аллотропных форм углерода, декорированных атомами металлов. Для некоторых структур (например, карбин с литием, графдиин с никелем и енин с атомами щелочных и щелочноземельных металлов) исследование сорбции водорода проводилось впервые, что свидетельствует о несомненной научной новизне диссертационной работы. *Практическое же значение имеют оценки водородной емкости и температур десорбции*, позволяющие давать рекомендации для экспериментального синтеза структур. *Практическую ценность представляет, также, приведенная в диссертации методика моделирования, обеспечивающая высокую точность вычисления энергетических характеристик слабосвязанных систем.*

*Достоверность полученных в работе результатов подтверждается использованием хорошо зарекомендовавших себя методов расчета свойств конденсированных тел, основанных на теории функционала электронной плотности и реализованных в тщательно протестированных программных пакетах; тщательным тестированием и подбором параметров моделирования для каждой из рассмотренных систем; а также сравнением с существующими экспериментальными и расчетными данными.*

Сравнение текста авторефера с текстом диссертации, представленной на сайте диссертационного совета, показывает, что автореферат полностью соответствует диссертации и адекватно отражает её содержание.

**Заключение:** Диссертационная работа Аникиной Е.В. «Компьютерное моделирование наноматериалов на основе углерода для применения в водородной энергетике» удовлетворяет всем требованиям положения «О порядке присуждения ученых степеней», предъявляемых 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.

Доктор физико-математических наук  
(специальность 01.04.13 - Электрофизика),  
старший научный сотрудник,

главный научный сотрудник лаборатории  
нелинейной динамики ФГБУН «Институт  
электрофизики Уральского отделения Российской  
академии наук»

Волков Николай Борисович  
12.05.2021

6200016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 106  
тел.: (343)267-87-96»  
e-mail: nbv@iep.uran.ru

Подпись Волкова Н.Б. заверяю

Ученый секретарь ФГБУН «Институт  
электрофизики Уральского отделения Российской  
академии наук»,

кандидат физико-математических наук



Кокорина Елена Евгеньевна  
12.05.2021