

## 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 Аникиной Екатерины посвящена вычислительным исследованиям углеродных материалов пониженной размерности с целью изучения их физико-химических свойств. Спустя 50 лет после теоретического открытия, одномерные формы углерода (карбиноподобные структуры) и сегодня привлекают внимание исследователей благодаря выдающимся механическим и электронным свойствам. Согласно прогнозам, моноатомные углеродные цепи имеют механическую прочность значительно выше таковой для алмаза, низкую работу выхода электронов и хорошую биосовместимость, что обеспечивает их потенциально широкое применение, в частности для холодных катодов и миниатюрных устройств нанoeлектроники. В то же время синтез макроскопических кристаллов карбина осложняется нестабильностью и высокой химической активностью  $sp^1$ -углерода.

Практическая актуальность работы связана с возможностью использования результатов в области водородной энергетике, в качестве эффективных контейнеров для хранения водорода.

Обращает на себя внимание широкий охват низкоразмерных объектов исследования (карбин, квазиодномерные углеродные материалы (углеродные нанотрубки), графидин, енин), а также широкий спектр примесных атомов, используемых в качестве активных центров адсорбции водорода (Li, Ni, Na, K, Ca) что позволило автору систематически изучить целый ряд эффектов декорирования поверхности материалов с различной структурой, типом химической связи, морфологией. Для достижения поставленных целей автором применен вычислительный метод теории функционала плотности (DFT), реализованном в программных пакетах типа SIESTA и VASP, являющийся одним из наиболее достоверных и широко применяемых в физике конденсированного состояния.

**Научную новизну и практическую значимость** работы определяют

1. Численное исследование новейших модификаций углеродных материалов: карбин, графидин, енин.
2. Оценка водородной емкости наноматериалов и поиск методов ее повышения имеют перспективу непосредственного применения в электроэнергетике и электронике.



Полученные результаты позволили автору обосновать ряд выводов о способах управления сорбционными свойствами, а также повышения эффективности водородных хранилищ на основе низкоразмерных углеродных материалов. Важное значение для дальнейшего развития данной тематики, по мнению рецензента, имеет реализованный диссертантом подход для оценки физического взаимодействия молекулярного водорода с декорированными углеродными наноструктурами. Развиваемый подход может быть успешно использован и в исследованиях других материалов, представляющих интерес для энергетики, атомной промышленности и космической отрасли.

Работа Аникиной Екатерины Владимировны представляет собой законченное научное исследование, которое вносит вклад в понимание закономерностей атомной, электронной структуры и физико-химических свойств низкоразмерных сред; в работе получены новые результаты, представляющие научную значимость и практическую ценность. Защищаемые положения четко сформулированы и хорошо обоснованы. Текст автореферата хорошо структурирован и дает цельное представление о выполненной работе.

По тексту реферата имеется ряд вопросов, требующих уточнения.

1. Так, автором обсуждается возможность практического использования карбина, декорированного литием. При этом, расчеты предсказывают, что наибольший интерес, с точки зрения стабильности представляет карбин типа  $\text{LiC}_6$  по сравнению с карбином типа  $\text{LiC}_4$ . В связи с этим было бы полезно уточнить: существует ли возможность обеспечения стабильности декорированного карбина с повышенной концентрацией  $\text{Li}$  при сохранении цепочечной структуры без её кластеризации?

2. Из текста реферата неясна методика прогнозирования водородной емкости изучаемых наноматериалов. Вероятно, для ее расчета использовались идеальные структуры нанотрубок, графидина и других модификаций углерода, часть из которых еще не синтезирована экспериментально. Учитывалось ли возможное влияние на водородную емкость неизбежных неоднородностей и дефектов материалов?

В целом работа производит хорошее впечатление, выполнена на актуальную тему, содержит новые научные данные и представляет интерес для практического применения. На основании изложенного считаю, что результаты работы и высокий уровень их интерпретации свидетельствуют о том, что диссертационная работа Аникиной Екатерины Владимировны «Компьютерное моделирование наноматериалов на основе углерода для применения в водородной энергетике» удовлетворяет требованиям пункта 2, подпунктов 9-14 «Постановление Правительства РФ от 24.09.2013 N 842 (ред. от 01.10.2018, с изм. от 26.05.2020) "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.

Даю свое согласие на обработку персональных данных.

Кандидат технических наук (специальности 05.17.02 Технология редких, рассеянных и радиоактивных элементов, 01.04.07 Физика твердого тела), доцент, руководитель научной лаборатории «Физика функциональных материалов углеродной микро- и оптоэлектроники», профессор кафедры физических методов и приборов контроля качества Физико-технологического института ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,

Зацепин Анатолий Федорович

23.04.2021

6200002, г. Екатеринбург, ул. Мира, 19  
тел.: +7 (343) 3759788  
e-mail: a.f.zatsepina@urfu.ru

Подпись Зацепина А.Ф. заверяю  
Ученый секретарь ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,  
Канд. тех. наук, доцент



Морозова В.А.