

ОТЗЫВ на автореферат диссертации Лубковой Татьяны Александровны «Механизм образования, диффузионные и адсорбционные свойства ряда углеродных наноструктур», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Согласно автореферату, диссертация Лубковой Т.А. посвящена теоретическому изучению условий и механизма образования эндоэдральных металлофуллеренов (ЭМФ) в плазме, изучению физико-химических параметров образования соединений углеродных нанотубок различной хиральности и диаметра с атомами и молекулами водорода и атомами некоторых d-элементов (Sc, Ti, V, Pd). Для расчетов данных систем автором применяется известные квантово-химические методы, хорошо зарекомендовавшие себя, что является подтверждением достоверности полученных результатов. В числе основных методов исследования применяется теория функционала плотности, а также метод квантово-механической молекулярной динамики (QM/MD) в рамках метода функционала плотности в приближении сильной связи (DFTB). Для исследования переходных состояний (потенциальных барьеров) применялся метод упругой ленты (Nudge Elastic Band- NEB). Квантово-химические расчеты выполнялись в известных и широко используемых в мировой практике программных пакетах VASP и DFTB+.

Среди наиболее значимых результатов работы отмечу следующие:

1. Сравнение скоростей изменения количества sp^2 -гибридизованных атомов углерода позволяет сделать вывод о том, что присутствие определенного количества атомов гелия практически удваивает скорость роста углеродного каркаса - предшественника фуллерена – это дает экспериментаторам качественную оценку концентрации гелия для оптимального режима синтеза фуллеренов в присутствии атомов скандия.

2. Моделирование взаимодействия (9,0) и (10,0)УНТ одиночными атомами скандия, титана, палладия и ванадия и их парами показало, что атомам рассмотренных металлов наиболее энергетически выгодно располагаться по периметру УНТ. Показано также, что образование пояса из таких атомов приводит к дополнительной стабилизации структуры, что в свою очередь, дает перспективу раскрытия механизма образования подобного покрытия УНТ.

Однако необходимо выделить следующие замечания:

1. В автореферате не приводится сравнение полученных результатов по адсорбции водорода на УНТ с многочисленными расчетами других авторов.

2. Несмотря на то, что работы автора были опубликованы в 2009-2011 годах, в автореферате не описаны современные экспериментальные работы по покрытию УНТ атомами скандия, титана, палладия и ванадия.

Отмеченные недостатки не снижают практическую ценность работы в целом. Полученные Лубковой Т.А. результаты новы и актуальны, полно представлены в престижных российских и зарубежных изданиях, в том числе, в научных журналах из списка ВАК. Апробация работы состоялась на ряде международных и всероссийских симпозиумах и конференциях.

Опубликованные автором печатные работы отражают содержание диссертации, а ее название также полностью соответствует проведенному исследованию. Диссертация удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а ее автор, Лубкова Татьяна Александровна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук, профессор

главный научный сотрудник

отдела новых методов биохимической физики

ФГБУН Институт биохимической физики РАН

Чернозатонский Л.А.

15 февраля 2016 г

Подпись Чернозатонского Л.А. удостоверяю

Кандидат химических наук

Ученый секретарь ФГБУН

Институт биохимической физики РАН



Собственноручную подпись
сотрудника Чернозатонского Л.А.
удостоверяю *И.И.И. Директор*

Долгая М.М.

Собственноручную подпись
сотрудника Долгой М.М.
удостоверяю *И.И.И. Директор*