



Department of Chemistry
University of Nevada, Reno
Sergey A. Varganov
Assistant Professor
(775) 784-1406
svarganov@unr.edu

ОТЗЫВ

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

Согласно автореферату кандидатской диссертации Лубковой Т.А., в работе проведено теоретическое изучение условий и предположительный механизм образования эндоэдральных металлофуллеренов в плазме, а также адсорбционных свойств углеродных нанотрубок с атомами нескольких d-элементов (Sc, Ti, V, Pd) и водородом при помощи методов квантовой химии. Квантово-химические расчеты выполнялись в известных и широко используемых в мировой практике программных пакетах, таких как, the Vienna Ab initio Simulation Package (VASP).

Безусловная актуальность работы и достоверность полученных результатов обусловлены выбором объектов исследования, методов исследования и четкостью постановки задач. Кроме того при наличии экспериментальных данных проводилось сопоставление с ними результатов, полученных в процессе вычислений, противоречий при этом не наблюдалось.

Основные положения диссертации Лубковой Т.А. нашли отражение в 6 публикациях, из них 4 статей в ведущих журналах, рекомендованных ВАК.

К несомненным достоинствам работы можно отнести:

1. Тщательно продуманную концепцию последовательности расчетов позволяющую смоделировать сложные физико-химические процессы, такие как взаимодействие водорода с углеродными нанотрубками и их покрытие металлами.

2. Подробный анализ результатов динамических расчетов, показывающий влияние атомов буферного газа на возможность формирования эндоэдральных комплексов металлофуллеренов.

Однако имеются общие незначительные замечания:

1. Хотелось бы увидеть более четкую формулировку вывода по поводу возможности использования рассмотренных углеродных нанотрубок в качестве эффективного сорбента водорода.

2. Более детальное описание расчетов констант скоростей реакций позволило бы лучше понять как значения этих констант связаны с барьерами реакций.

Отмеченные недостатки не снижают ценность работы в целом.

В целом диссертационная работа Лубковой Т.А. является самостоятельным, законченным исследованием. Тема исследования соответствует заявленной научной специальности. Считаю, что диссертационная работа удовлетворяет требованиям, предъявляемым 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.

Доцент Университета штата Невада, Рино,
канд. физ.-мат. наук, Ph.D.

С. А. Варганов (S.A. Varganov)

24 февраля 2016 г. (February 24, 2016)



Department of Chemistry
University of Nevada, Reno/0216
1664 N. Virginia Street
Reno, Nevada 89557-0216