

## ОТЗЫВ

научного руководителя на диссертационную работу Лубковой Татьяны Александровны «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».

Татьяна Александровна успешно окончила в 2009 году химико-металлургический факультет Сибирского Федерального Университета по специальности «Физическая химия». В период с 2010 года по 2014 год обучалась в очной аспирантуре Сибирского государственного технологического университета по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Научная деятельность Татьяны Александровны началась с 2006 года. Она связана с квантово-химическим моделированием и теоретическим материаловедением. Основная часть работы осуществляется в группе квантовой химии лаборатории Физики магнитных явлений Института физики СО РАН.

За время работы Татьяна Александровна показала себя как трудолюбивый, дисциплинированный, грамотный, целеустремленный исследователь, способный критически анализировать материал из различных источников информации, делать на основе такого анализа выводы, ставить научные задачи и самостоятельно находить их решения.

За период работы Татьяной Александровной в соавторстве опубликовано 13 работ, в числе которых 11 в журналах, рекомендованных ВАК для защиты кандидатских и докторских диссертаций, таких как «Химическая физика», «Журнал экспериментальной и теоретической физики», «Письма в ЖЭТФ». Опубликована монография «Теоретическое исследование структуры и свойств тонких пленок карбида кремния» (А.А. Кузубов, Т.А. Кожевникова (Лубкова), Н.С. Елисеева).

В момент обучения в аспирантуре Татьяна Александровна принимала активное участие в различных конкурсах молодых ученых. Она является лауреатом «Открытого конкурса на лучшую научную работу» в номинации «Инновационный подход» (Казань, 2009), лауреатом премии главы города молодым талантам в номинации «за высокие достижения в научно-учебной деятельности» (Красноярск, 2010). Была награждена дипломом X всероссийской выставки «Научно-техническое творчество молодежи» за проект «Теоретическое исследование процессов сорбции и диффузии лития в наноструктурах бора и боридов лития различного типа для оценки перспективы их использования в литий-ионных батареях» и медалью Всероссийского конкурса научно-исследовательских работ студентов вузов в области нанотехнологий и наноматериалов (Москва, 2010). Награждена дипломом открытого конкурса на лучшую работу студентов по естественным, техническим и гуманитарным наукам в вузах в разделе «химические науки, химическая технология, биотехнология, биоинженерия, химическое машиностроение» за научное исследование в области химии и химической технологии.

Татьяна Александровна являлась лауреатом стипендии Правительства в 2010 году и стипендии Президента Российской Федерации в 2012-2013 годах для аспирантов, осуществляющих перспективные научные исследования и разработки по приоритетным направлениям модернизации российской экономики. Принимала участие в научной стажировке по программе обмена аспирантами в Гонконгском университете науки и технологии на факультете химии (март-июнь 2011 года).

Тема диссертационного исследования Татьяны Александровны весьма актуальна в настоящее время, поскольку открытие фуллеренов и углеродных нанотрубок (УНТ) стимулировали поиск и получение на их основе наноматериалов с уникальными свойствами и сферой применения. Они могут послужить заменой функциональных частей в компонентах электронной техники, быть основой для получения новых материалов, выступать в роли сорбентов и так далее. Возможности применения таких структур возрастают при переходе к их химически модифицированным соединениям. Например, фуллерены с внедренными атомами

металла называют эндоэдральными металлофуллеренами, которые могут быть потенциальными кандидатами для использования в различных областях, таких как фотогальваника, оптоэлектроника, биомедицинская инженерия и другие. А комплексные соединения УНТ с атомами *d*-элементов могут использоваться в качестве электродов и элементов наноэлектроники. В течение некоторого времени УНТ и их комплексы с атомами *d*-элементов рассматривались в качестве объектов для «чистой» водородной энергетики.

Несмотря на широкую область возможного применения каркасных углеродных наноматериалов, существует ряд нерешенных проблем, которые замедляют внедрение этих материалов в повседневную жизнь. Остается много вопросов о механизме их формирования, что является препятствием для синтеза соединений на их основе с заданными свойствами. Экспериментальное получение наноматериалов с определенными функциональными характеристиками требует не только развития соответствующих методов синтеза, но и теоретического изучения и понимания процессов, происходящих при получении новых структур. Основу этого составляют сведения об электронном строении и природе межатомных взаимодействий в данных наноматериалах. Использование методов квантовой химии позволяет непосредственно моделировать эффекты изменения структуры и химического состава веществ, не прибегая к проведению дорогостоящих экспериментов.

Важными результатами работы Лубковой Т.А. являются следующие:

- выявлены условия и предположительный механизм образования эндоэдральных фуллеренов в плазме;
- впервые проведено систематическое исследование физико-химических особенностей процесса образования покрытия атомами переходных металлов поверхностей углеродных нанотрубок;
- установлено, что вследствие малых значений энергии связывания и высоты потенциальных барьеров миграции атомов вдоль поверхности данное покрытие не может быть равномерным и однослойным, то есть указанные объекты не перспективны для хранения молекулярного водорода;
- получены значения физических параметров процесса диссоциативной хемосорбции водорода и его диффузии по поверхности углеродной нанотрубки, которые показывают, что использование УНТ в качестве сорбентов водорода без использования дополнительных условий (катализатора, повышенный температуры и так далее) затруднено.

Основные положения диссертации Татьяны Александровны отражены в 6 публикациях, из них 4 статьи в ведущих журналах, рекомендованных ВАК.

На основании выше сказанного 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».

Научный руководитель,  
доцент кафедры физики СибГТУ,  
канд. физ.-мат. наук



И.О. Краснов

