

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

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ковалевой Е.А. «Исследование контактных взаимодействий в интерфейсах на основе некоторых 0D и 1D нанообъектов и ферромагнитных материалов методами квантовой химии», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния.

Как следует из материалов автореферата диссертации Е.А. Ковалевой, работа посвящена теоретическому изучению контактных явлений в нанокомпозитах на основе ферромагнитных металлов (Fe, Co, Ni), а также полуметаллического манганиита стронция-лантана ($\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$), с нанотрубками, фуллереном C_{60} и комплексным соединением $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$. Строение и свойства исследованных систем были изучены с использованием теории функционала плотности. На основе проведенных расчетов были сделаны выводы о наличии спиновой поляризации и структурной перестройки в указанных системах, определен механизм и рассчитаны барьеры разложения соединения $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$ на поверхности железа $\text{Fe}(100)$.

Актуальность выбранной диссидентом темы не вызывает сомнений ввиду интереса исследователей к поиску новых материалов для спинотроники, включая создания спиновых клапанов и тонкопленочных покрытий благородных металлов.

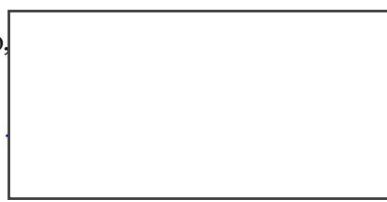
Среди наиболее значимых результатов работы хотелось бы отметить следующие:

- 1) Установлены различия в перераспределении электронной плотности при контакте с ферромагнитной подложкой для углеродных и BNnanoструктур.
- 2) Показана сильная зависимость величины спиновой поляризации на уровне Ферми от взаимного расположения нанообъекта и подложки.
- 3) На основании проведенных квантово-химических расчетов и сопоставления их с экспериментальными данными предложен катализитический механизм термического разложения $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$ на поверхности $\text{Fe}(100)$.

Необходимо отметить, что результаты работы были опубликованы в зарубежных журналах первого и второго квартиля, а также представлены на ряде конференций.

Работа Е.А. Ковалевой является законченным исследованием, достаточно апробирована, удовлетворяет требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ему 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.



А. Варганов (S.A. Varganov)

017 г. (March 7, 2017)



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