

Отзыв

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

Тенденции развития современной нанoeлектроники требуют решения задач получения новых материалов с заданными свойствами. Поэтому актуальность диссертационной работы Ковалевой Е.А., посвященной исследованию механизма формирования и свойств нанокompозитных материалов, не вызывает сомнений.

Согласно содержанию автореферата, основное внимание в работе уделяется интерфейсам на основе фуллеренов и углеродных нанотрубок с поверхностями железа, кобальта, никеля, а также полуметаллического манганита лантана-стронция. Построены различные структурные модели нанокompозитов, исследованы закономерности распределения спиновой плотности в системах и рассчитана величина спиновой поляризации нанотрубок и фуллерена на уровне Ферми. Кроме того, в работе были рассмотрены также нанокompозиты на основе VN нанотрубок и смоделирован процесс структурной перестройки и разложения комплекса иридия на поверхности железа.

К работе имеется ряд вопросов и замечаний:

-отсутствует сопоставление результатов, полученных методом DFT+U и с применением более точных методов, в частности, с использованием гибридных обменно-корреляционных функционалов;

-не вполне ясна мотивация использования приближения локальной спиновой плотности для расчета интерфейсов ферромагнитных металлов с нанотрубками «зигзаг» и обобщенного градиентного приближения для аналогичных интерфейсов с нанотрубками «кресло», отсутствует прямое сопоставление этих результатов. Чем обусловлен выбор метода исследования в данном случае?

Высказанные вопросы и замечания не снижают общей положительной оценки диссертационной работы. Работа написана на высоком уровне и является законченной научной работой, достоверность полученных результатов не вызывает сомнений и обусловлена применением проверенных современных методов квантовой химии.

Согласно анализу автореферата, работа отвечает всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «физика конденсированного состояния».

Козлова Светлана Геннадьевна,

Доктор физико-математических наук, за [] торий физической химии конденсированных сред. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт неорганической химии им. ак. А.В. Николаева (ИНХ СО РАН), 630090, Россия, г. Новосибирск, ул. ак. Лаврентьева, д.3, Тел. 8(393)3307531, Электронная почта: []

Подпись Козловой С.Г. заверяю

Ученый секретарь ИНХ СО РАН

д.х.н.

Я согласна на включение персонифицированных документов в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку. 06.03.2017.г

