

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ковалевой Евгении Андреевны
**«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».

Работа Е.А. Ковалевой посвящена теоретическому моделированию нанокompозитных материалов на основе ферромагнитных металлов и наноструктур различного состава и морфологии.

В настоящее время перед науками о материалах стоят актуальные задачи получения композитов с заданными свойствами. Например, композиты на основе полимеров, содержащие магнитные наночастицы, могут быть использованы при создании материалов с магнито-индуцируемой памятью формы. Кроме того, создание новых материалов для электроники на основе допирующих наночастиц на основе углерода и полимеров имеет долгосрочную перспективу в разных областях применения. Одной из научных проблем является связь структуры и свойств новых материалов. Исследование взаимодействия на межфазной границе между наночастицей и матрицей имеет первостепенное значение. В разделе «Актуальность работы» диссертант специально подчёркивает, что применение методов квантовой химии помогает без проведения дорогостоящего эксперимента определить наиболее перспективные для использования в той или иной области составы материалов.

В первой части работы изучены интерфейсы $3d$ ферромагнитных металлов железа, кобальта и никеля с фуллереном C_{60} , углеродными и BN-нанотрубками. Установлено наличие спиновой поляризации наноструктур во всех исследованных композитах. При этом в случае BN-нанотрубок поляризация наблюдается только в области непосредственного контакта с металлом, а остальная часть нанотрубки сохраняет электронную структуру диэлектрика с запрещенной зоной $\sim 3,8$ эВ. Показано, что на величину спиновой поляризации C_{60} значительно влияет его расположение относительно поверхности железа; величина рассчитанных потенциальных барьеров перехода между конфигурациями интерфейса свидетельствует о подвижности фуллерена на поверхности $Fe(001)$. Вторая часть работы посвящена моделированию аналогичных интерфейсов углеродных нанотрубок и C_{60} на поверхности полуметаллического материала

$\text{La}_{0,7}\text{Sr}_{0,3}\text{MnO}_3$. Показана ключевая роль взаимодействия атомов марганца и углерода в формировании спиновой поляризации фуллера и нанотрубок. При этом нанотрубки, расположенные на поверхности, оканчивающейся слоем SrO , не являются спин-поляризованными. В третьей части диссертации рассматривается механизм разложения ацетилацетонатного комплекса иридия на поверхности железа. На основании проведенных квантово-химических расчетов предложен механизм данной реакции и проведено его сопоставление с механизмом разложения $\text{Ir}(\text{acac})(\text{CO})_2$ в газовой фазе.

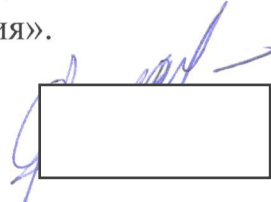
Работа представляется актуальной, выполнена в полном объеме на хорошем уровне. Достоверность научных данных и выводов не вызывает сомнений в связи с использованием современных квантово-химических подходов к моделированию на основе метода функционала плотности (DFT). Основные результаты работы представлены в пяти оригинальных научных статьях в журналах, входящих в перечень ВАК РФ. Материалы диссертации неоднократно докладывались на международных и всероссийских конференциях.

К работе существуют некоторые замечания, не снижающие общей положительной оценки исследования и касающиеся в основном графического представления результатов. В частности, хотелось бы большего единообразия в изображении атомной структуры различных наноконструкций. Часть картин распределения спиновой плотности является малоинформативной ввиду того, что области разного цвета перекрываются друг с другом. Кроме того, подписи на некоторых рисунках практически нечитаемы из-за малого шрифта.

В целом считаю, что диссертационная работа соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям (п. 9 положения «О порядке присуждения учёных степеней», утверждённого Постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842), а её автор Ковалева Евгения Андреевна безусловно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния».

10.03.2017

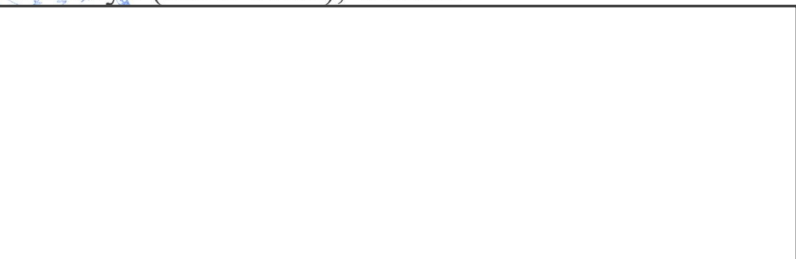
Смыслов Руслан Юрьевич



кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник
лаборатории №10 Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Института высокомолекулярных соединений
Российской академии наук (ИВС РАН), ФАНО

199004, г. Санкт-Петербург
тел: +7(812) 328-8311

Подпись: С. Смыслов
заведующий
и.о. зам. дир.
С.И.И.т./С.В.И.т.



o.ru