

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ковалёвой 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

Диссертационная работа Ковалёвой Е.А. посвящена теоретическому исследованию ряда наноструктур потенциально перспективных для спинтроники. Данная тематика привлекает большой интерес со стороны современной науки и имеет важное значение для развития области спинтроники. В автореферате диссертации представлены результаты исследования перспективных наноструктур для применения в качестве основы для устройств спиновой фильтрации (разработка которых является одной из наиболее важных и актуальных задач для данной области науки). При этом подложка на которой находится наноструктура может существенно влиять на её свойства, что требует детального исследования влияния подложки и особенностей границы раздела на атомном уровне.

До проведения дорогостоящих и трудоемких экспериментальных исследований, крайне желательными являются теоретические оценки для проведения более направленных экспериментов. С этой точки зрения, диссертация Ковалёвой Е.А. важна для развития современной науки.

Выбранный в работе метод теории функционала электронной плотности кажется адекватным для решения поставленных задач. Известно, что он демонстрирует высокую точность в описании электронных и магнитных свойств различных материалов, и, что особенно важно, в описании эффектов на границе раздела. Ковалёва Е.А. детально изучила электронные и магнитные свойства границ разделов между кресельными и зигзажными углеродными/BN нанотрубками и ферромагнитными поверхностями Co(0001) и Ni(111) (§3.1), углеродными нанотрубками и поверхностью LSMO (§4.1). Два параграфа в диссертации посвящены исследованию миграции фуллерена C<sub>60</sub> по поверхности Fe(001) (§3.2) и LSMO (§4.2). Данные исследования несколько выпадают из общей логики работы, но с другой стороны разнообразят работу.

Судя по данным из автореферата получены результаты хорошего уровня. Проанализирована электронная структура на границе раздела для всех рассмотренных наноструктур. Проведённый анализ энергетики наноструктур позволил предсказать оптимальную атомную геометрию и положение фуллеренов на поверхностях Fe(001) и LSMO.

В Главе 5 рассмотрен процесс термического разложения комплексного соединения Ir(асас)(CO<sub>2</sub>). Составлена уточненная схема механизма реакции термического разложения. Показано существование в газовой фазе долгоживущего метастабильного состояния при его термоллизе. Показано, что взаимодействие с поверхностью стенок реактора играет ключевую роль в процессе термораспада соединения.

Следует отметить ряд недостатков данной работы в основном связанных с небрежностью изложения результатов. В тексте имеется также ряд мелких грамматических ошибок и некорректных слов (например, «могущих»), а также выражений (например, «...приобретая электронную структуру проводника», «локальная металличность»). Рисунок 6 некорректно пронумерован (должен быть рисунок 5). Также стоит отметить низкое качество

этого рисунка и практически нечитаемые подписи к нему. Не расшифрованы часть сокращений (ТМ, CNT, BNNT)

Несмотря на описанные недостатки, работа Ковалёвой Е.А представляет собой законченный труд, имеющий безусловную научную ценность. Работа полностью соответствует требованиям п. 8 “Положения о порядке присуждения ученых степеней”, а её автор Евгения Андреевна Ковалёва заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

ведущий научный сотрудник

лаборатории «Неорганические наноматериалы»

Национальный исследовательский

технологический университет «МИСиС»,

д.ф.-м.н.

119049, Ленинский проспект 4, Москва,

Российская Федерация

Телефон: +7 (916) 47 46 664

E-mail: pbs

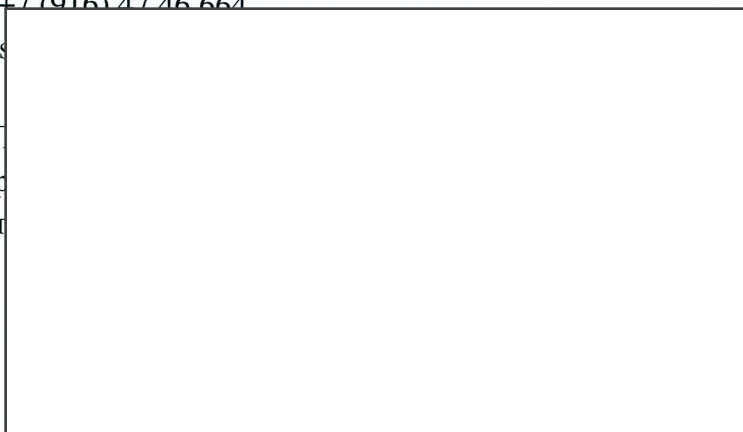
Подпись П

Проректор

общим во



Сорокин П.Б.



И.М. Исаев