

## **ОТЗЫВ**

на автореферат диссертации Абрамовой Ксении Андреевны «Компьютерное моделирование литизации/делитизации силиценового анода для литий-ионных батарей», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Диссертация Абрамовой Ксении Андреевны посвящена изучению высоко актуального и интересного объекта – двумерного кремния. Его исследование представляет собой высокую фундаментально-научную значимость для понимания и описания двумерных материалов, и большое практическое значение для потенциального применения в перспективных устройствах, например, в литий-ионных аккумуляторах. Несомненной новизной является адаптация метода молекулярной динамики к моделированию этого нового объекта и, в частности, оригинальный метод «зондирования», использованный для изучения структуры двумерного квазикристаллического двухслойного материала. Представленный в автореферате материал хорошо изложен и оформлен. По результатам проведенных исследований опубликовано 10 статей в ведущих международных изданиях. Работы автора высоко цитируются: по базе РИНЦ она имеет 28 публикаций с общим количеством цитирований 260 и индексом Хирша 11.

Замечания и вопросы по автореферату:

- 1) Моделируемая система содержала 300 атомов кремния. Можно ли считать такую систему адекватной для описания макроскопических свойств, т.е. не зависят ли результаты моделирования от размера системы?
- 2) Атомы подложки были закреплены. Любопытно было бы «открепить» хотя бы верхний слой подложки. Как повлияет это на результаты и устойчивость силиценовых слоев?
- 3) На стр. 14 авторефераты написано: «учитывая более высокую заполняемость канала литием на Ni...». Как определялась заполняемость канала? Разве она не является входным параметром модели: сколько ионов лития введёте, столько и будет в канале?

Судя по автореферату и публикациям соискателя можно сделать вывод, что диссертация «Компьютерное моделирование литизации/делитизации силиценового анода для литий-ионных батарей» обладает научной новизной, имеет научную и практическую ценность, и полностью отвечает квалификационным требованиям,

установленным в п. 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, и Паспорту специальности, а ее автор Абрамова Ксения Андреевна заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Болтачев Грэй Шамилевич,  
доктор физико-математических наук,  
1.3.8 – физика конденсированного состояния,  
1.3.13 – электрофизика, электрофизические установки.

Ведущий научный сотрудник лаборатории комплексных электрофизических исследований Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт электрофизики Уральского отделения РАН.

620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 106, ИЭФ УрО РАН

Тел.: (343) 2678820

E-mail: grey@iep.uran.ru

7 марта 2023 г.

Я, нижеподписавшийся, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертационной работы Абрамовой Ксении Андреевны, и их дальнейшую обработку.

Подпись д.ф.-м.н. Болтачева Г.Ш. заверяю

Ученый секретарь ИЭФ УрО РАН, к.ф.-м.н.



Е.Е. Кокорина