

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу

Абрамовой Ксении Андреевны

«Компьютерное моделирование литизации/делитизации силицевого анода для литий-ионных батарей»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности
1.4.4. – физическая химия.

Актуальность темы. Диссертация Абрамовой К.А. «Компьютерное моделирование литизации/делитизации силицевого анода для литий-ионных батарей» посвящена основанному на компьютерном моделировании обоснованию применимости новых материалов анода для литий-ионных аккумуляторов (ЛИА) нового поколения. Целью диссертационного исследования является проведение комплекса вычислительных исследований для определения возможности использования двухслойного силицена в качестве материала анода для ЛИА. Повышение эффективности функционирования анода потребовало использования как бездефектного силицена, так и силицена, содержащего различные дефекты вакансионного типа. Для поддержки силицена использованы четыре типа различных металлических подложек. Актуальность решаемой задачи связана с развитием гибкой электроники, необходимостью создания высокопроизводительных твердотельных микробатарей, используемых в персонализированных медицинских устройствах и устройствах для интеллектуального связывания различных биологических органов. Недостатком современных аккумуляторов является их относительно небольшая емкость, большой вес и малая скорость зарядки. Материалы анода должны иметь высокие характеристики удельной емкости, быть безопасными при эксплуатации, давать высокие плотности тока и иметь низкую цену. Силицен представляется как основной кандидат для использования в качестве анодного материала в ЛИА. Оригинальность работы заключается в создании динамической модели, имитирующей процессы литизации и делитизации анода литий-ионной батареи. Кроме того, в работе рассмотрены несколько подходов, позволяющих исследовать локальную структуру сложных систем. Также исследовано влияние материала подложки и дефектов, присутствующих в силиcene, на упаковку атомов лития в силицевых каналах.

Научная новизна и практическая значимость исследований. В диссертации К.А. Абрамовой представлены результаты, обладающие научной новизной, имеющие практическую значимость:

Вход. № 36/05 «21» 03 2023 г.
ОАНПК УПКВК УРФУ

- впервые на атомном уровне в рамках молекулярно-динамической модели исследованы механизмы зарядки и разрядки отрицательного электрода, выполненного в виде двухслойного силицена, размещенного на металлической подложке;
- установлена зависимость заполняемости силиценового анода литием от материала подложки (Ag, Al, Cu, Ni) и от типа вакансионных дефектов (моно-, би-, три- и гексавакансии), присутствующих в силицене;
- определены зависимости коэффициента диффузии атомов лития в силиценовом канале, а также внутренней энергии литиевой системы и объема канала от степени его заполнения литием;
- разработан метод расчета тензора напряжений, отражающего напряженное состояние заполненного литием двухслойного силицена, показано, что в подавляющем большинстве случаев наиболее значимыми напряжениями оказываются напряжения, нормальные к стенкам канала, рассчитаны распределения компонент тензора напряжений вдоль направлений «зиг-заг» и «кресло»;
- двухслойный силицен на алюминиевой подложке демонстрирует наибольший запас прочности (девятикратный) по отношению к пределу прочности силицена при одноосном растяжении, а запас прочности этого двумерного материала на медной подложке оказывается наименьшим (трехкратным) среди четырех исследуемых подложек;
- детальный анализ структуры двумерного материала путем построения комбинированных многогранников впервые применен как для исследования упаковки атомов лития в силиценовых каналах, так и для изучения структуры поверхности стенок канала с помощью ионного зонда;
- полученные результаты не только объясняют физические свойства силицена, получаемого на различных подложках, но также имеют прогностический характер, существенно ускоряя и облегчая создание нового двумерного материала для анода ЛИА.

Обоснованность и достоверность научных положений и выводов.

Обоснованность и достоверность полученных результатов обусловлена применением в вычислениях тестированного программного комплекса LAMMPS, корректным представлением полученных расчетных данных.

Результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на многих научных конференциях.

Рекомендации по использованию результатов диссертации.

Результаты диссертационного исследования могут быть использованы как теоретическая база для конструирования анодов литий-ионных батарей нового поколения, а также для использования силицена в производстве различных микроэлектронных устройств. Полученная информация и разработанные методы анализа механической устойчивости и детальной структуры представляются пригодными для дальнейшего расчета и анализа физических свойств различных тонких двумерных материалов.

Краткая характеристика основного содержания диссертации.

Диссертация Абрамовой К.А. состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы и приложения.

Во введении обосновывается актуальность диссертационного исследования; формулируется цель и основные задачи работы; описывается предлагаемый автором подход к решению поставленных задач; характеризуется степень новизны полученных результатов и их апробация.

Первая глава представляет собой литературный обзор, разбитый на три части. Первая часть посвящена электронным и механическим свойствам автономного силицена. Во второй части обзора рассматривается экспериментальный метод получения силицена на различных подложках. Отмечается влияние подложек на электронные свойства силицена. Теоретическое исследование взаимодействия силицена с литием описывается в третьей части литературного обзора.

Вторая глава посвящена изложению используемого в работе метода молекулярной динамики применительно к изучению двумерных систем. Здесь отражены структура силицена, используемые потенциалы межатомного взаимодействия, метод заполнения силиценового канала литием и его разгрузки, приведены геометрические параметры модели, а также данные о применяемых электрических полях.

Третья глава включает результаты проведенного автором исследования кинетических и энергетических характеристик лития в силиценовых каналах. Здесь же представлены профили плотности атомов лития в каналах на различных металлических подложках.

Четвертая глава содержит данные о локальной структуре упаковок атомов лития в силиценовых каналах и данные о структуре стенок каналов, представленные в форме распределений геометрических элементов многогранника Вороного и комбинированных многогранников.

Пятая глава демонстрирует используемый автором метод расчета механических свойств стенок силиценовых каналов после их заполнения литием, а также после полного освобождения каналов от лития. Метод основан на определении тензора

напряжений и построении распределений компонент тензора по длине и ширине канала. В большинстве случаев наиболее значимыми компонентами напряжений были напряжения, нормальные к стенкам каналов. Напряжения, связанные с интеркаляцией лития, существенно уступают пределу прочности силицена при одноосном растяжении.

В заключении подводится итог проделанной работы, излагаются основные положения проведенного автором сравнительного анализа моделирования процессов интеркаляции / деинтеркаляции в двухслойном силиcene на различных металлических подложках, отражаются достоинства и недостатки исследованных модельных анодов.

Замечания по работе. К содержанию работы могут быть сделаны следующие замечания:

1. Несмотря на достаточно подробное описание разработанной модели и тщательно выполненные оценки используемых в модели параметров, в работе отсутствует объяснение, каким образом практически создавалось постоянное электрическое поле в программном продукте LAMMPS.
2. В работе нет оценки гравиметрической емкости рассмотренных анодов, что важно для осуществления практической реализации предложенных конструкций анода.
3. Чем объясняются флуктуации локальных напряжений на рис. 5.4 – 5.10 и связаны ли они с используемым методом разбивки силиценового листа на элементарные площадки?

Приведенные вопросы и замечания не снижают общее положительное впечатление о диссертации и носят проясняющий характер.

Общее заключение.

Основные результаты диссертации опубликованы в 16 научных работах, в том числе 10 научных статьях в рецензируемых журналах, включенных ВАК в перечень ведущих периодических изданий. Автореферат и опубликованные работы достаточно полно отражают основное содержание диссертации, характеризуют результаты проведенных исследований.

Уровень решаемых задач представляется соответствующим требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание степени кандидата физико-математических наук. Содержание диссертации соответствует специальности 1.4.4. – Физическая химия.

Диссертационное исследование Абрамовой Ксении Андреевны «Компьютерное моделирование литизации/делитизации силиценового анода для литий-ионных батарей» является завершенной научно-квалификационной работой, которая по

✓

20.03.2023

Gr