

ОТЗЫВ
официального оппонента на диссертационную работу
Абрамовой Ксении Андреевны
«Компьютерное моделирование литизации/делигитизации силиценового анода для
литий-ионных батарей»,
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических
наук по специальности
1.4.4. – физическая химия.

Создание электрохимических экологически безопасных источников тока, способных работать в условиях средних и низких температур с высокими значениями удельной энергии, является важной инженерной задачей. На сегодняшний день наиболее перспективными и распространенными типами аккумуляторов являются литий-ионные источники тока. Одной из основных задач при конструировании аккумуляторов является увеличение емкости отрицательного электрода по отношению к ионам лития. В основном, материалом для отрицательных электродов для Li-ионных батарей является графит, либо графитоподобные углеродные структуры, которые формируют интеркалированную Li-C систему. Поскольку емкость такой системы невелика, продолжается поиск качественно новых анодных материалов с высокой емкостью по литию. Кристаллический кремний имеет теоретическую емкость по обратному поглощению лития и энергетическим характеристикам, превышающую аналогичные характеристики для углерода более чем в 10 раз. Однако, необратимые структурные деформации, происходящие в объемном кремнии в процессе литирования налагаются ряд ограничений на применение данного материала. Таким образом, **актуальность** исследования связана с поиском новых материалов улучшающих характеристики работы ЛИА.

В диссертационной работе Абрамовой К.А. исследована возможность использования двухмерных композитных материалов в конструкции литий-ионных аккумуляторов (ЛИА). В качестве объекта исследования автор выбрал двухмерную модификацию кремния – силицен, который располагался на различных металлических подложках, такой материал имеет новые перспективы в отраслях, связанных с хранением энергии, благодаря своей совместимости с электроникой на основе кремния. Как следует из литературного обзора, на сегодняшний день существует большое количество как теоретических так и экспериментальных работ, которые направлены на исследование свойств силицина, в том числе на определение влияния металлических и неметаллических подложек на электронную проводимость однослойного кремния. Из приведенных исследований следует, что контакт с металлом приводит к возникновению проводниковых свойств

в силицине. Таким образом, выбор в качестве объекта исследования систем «силицен-металлическая подложка» диктуется с одной стороны высокой проводимостью такого материала, а с другой стороны – возможностью экспериментального получения тонких пленок кремния на представленных подложках. В качестве основного метода исследования таких систем в работе предлагается метод молекулярной динамики (МД), данный метод имеет ряд преимуществ, в том числе: возможность работать с относительно большими системами (тысячи и десятки тысяч частиц), а также моделировать динамические процессы, протекающие в исследуемых системах. Во второй главе диссертации автор описывает используемые приближения, которые налагались на исследуемые системы, а также приводит обоснование для выбора полуэмпирических потенциалов, которые применялись для описания взаимодействия в таких системах. Формы таких потенциалов широко известны и разработаны для описания конкретных структур, с учетом особенности физического взаимодействия в исследуемых материалах. В качестве среды для реализации МД модели Абрамова К.А. использовала код LAMMPS – широко известный инструмент для работы с молекулярно-динамическими моделями. Все это обеспечивает **достоверность** полученных результатов и **обоснованность** сделанных утверждений.

Главы с третьей по пятую посвящены обсуждению полученных результатов. Рассуждения выстраиваются от общих наблюдений к описанию более индивидуальных для каждой системы особенностей, также в четвертой главе приводится разработанный автором метод исследования локальной структуры, суть которого заключается в построении единичного многогранника вокруг интеркалированного в силиценовый канал иона Li^+ . В пятой главе приводятся данные по внутренний напряжениям, которые развиваются в силиценовых листах при их расположении на различных подложках. Интересным результатом является разрушение силиценового канала, включающего крупные дефекты, на медной подложке, автор предполагает, что данный эффект может быть результатом высокой адгезии силицина к поверхности подложки, а также наименее отрицательной внутренней энергии литиевой подсистемы. Разработанные методы и подходы отражают **теоретическую** значимость диссертации.

В диссертации Абрамовой К.А. показана возможность использования тонкопленочного анода на основе плоского кремния в конструкции ЛИА. Представленная модель включает в себя несколько варьируемых параметров: дефектность силиценовых листов, а также материал подложки, на котором располагался силиценовый канал. Выбор именно такого набора параметров обусловлен существующими на сегодняшний день тенденциями при

экспериментальном получении тонких пленок и их дальнейшем исследовании. Известно, что дефектность материала может оказывать влияние на его электронные и механические свойства, а поведение дефектов в некотором физико-химическом процессе будет оказывать влияние на характеристики материала, особенно это оказывается важным, когда речь идет о структурах низкой размерности, где концентрация дефектов оказывается выше и отсутствует объемная фаза. **Практическая** значимость работы заключается в разработке такой модели, которая нацелена на то, чтобы описать те особенности, которые могут проявиться при работе с представленными системами.

Диссертационное исследование Абрамовой К.А. прошло **апробацию** на российских и международных конференциях, результаты опубликованы в 10 статьях в рецензируемых отечественных и международных журналах.

Диссертация и автореферат грамотно оформлены, повествование выстроено логично. При ознакомлении с содержанием работы возник ряд вопросов и замечаний:

1. В пункте 2.5 (стр. 41- 43) обсуждается выбор оптимальных параметров МД системы при моделировании литизации и делитизации силиценового канала. Автор указывает, что расстояние между силиценовыми листами в модели составляло 7.5 Å, насколько это соответствует действительности? Существуют ли экспериментальные/теоретические работы, где эта характеристика обсуждается?
2. Известно, что в объемных кристаллах при плавлении регистрируется до 0.1% точечных дефектов, в диссертации при обсуждении концентрации дефектов в силиценовых листах речь идет о концентрациях 3, 6, 9 и 18%. Чем обосновывается такая высокая концентрация дефектов в силиценовых листах?
3. Из текста следует, что размеры системы составляли $4.8 \times 4.1 \times 2.0$ nm, по меркам молекулярной динамики это достаточно небольшая система, чем был обусловлен выбор такой небольшой системы? Исследовался ли размерный эффект такой системы, т.е. проводилась ли какая-либо оценка масштабируемости полученных в работе результатов?

Высказанные замечания не снижают ценности и достоверности полученных результатов и носят уточняющий характер. Из всего вышеизложенного можно сделать заключение, что диссертационная работа Абрамовой Ксении Андреевны «Компьютерное моделирование литизации/делитизации силиценового анода для литий-ионных батарей» по степени разработанности и актуальности темы, а также

достоверности и обоснованности полученных результатов, соответствует требованиям п.9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ и ее автор Абрамова Ксения Андреевна заслуживает присуждения ученой степени кандидат физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Официальный оппонент,
Купряжкин Анатолий Яковлевич
доктор физико-математических наук по специальности 1.3.14. («Теплофизика и теоретическая теплотехника»), профессор
Заведующий учебно-научной лабораторией ЯМР и масс-спектрометрии,
ФГАОУ ВО Уральский федеральный университет им. первого Президента России
Б.Н. Ельцина, физико-технологический институт
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира 19
тел: 8(343) 375-41-46
e-mail: a.ya.kupryazhkin@urfu.ru

Купряжкин Анатолий Яковлевич

17 марта 2023 г.

Подпись Купряжкина А.Я. заверяю:

Ученый секретарь ученого совета УрФУ

Морозова В.А.

