

ОТЗЫВ

официального оппонента доктора физико-математических наук Полухина Валерия Анатольевича на диссертационную работу 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.

Актуальность темы диссертационного исследования. Тема диссертационной работы К.А. Абрамовой актуальна, поскольку развитие рынка литий-ионных аккумуляторов на сегодняшний день направлено на разработку новых конструкционных материалов составляющих изделие, а также на повышение емкости хранимой энергии. Двухмерные слоистые структуры имеют широкие перспективы для внедрений в область микроэлектроники, однако, исследование физико-химических свойств таких структур затруднено, ввиду их нестабильности и малого размера. В данном случае методы компьютерного моделирования служат мощным инструментом для исследования. В частности, в диссертации Абрамовой К.А. была представлена разработанная молекулярно-динамическая модель, описывающая процессы, протекающие в анодной области литий-ионного аккумулятора. В работе были тщательно подобраны наиболее эффективные композитные соединения 2D-мерного кремния, расположенного на металлических подложках, такие композиты имитировали поведения анода литий-ионных аккумуляторов в процессах интеркаляции и деинтеркаляции лития. В работе была проведена качественная оценка возможного влияния дефектов в силицене. При создании модели анодов из тонкопленочных материалов автором был проведен анализ влияния дефектов на характеристики таких композитов при их литировании. Поскольку укрупнение таких дефектов может привести к разрушению 2D - кремниевой пленки при контакте интеркалирования лития с металлической подложкой и непригодности изделия.

Степень обоснованности научных положений выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации. Обоснованность и

достоверность полученных в работе данных основана на использовании апробированных полуэмпирических потенциалов для описания взаимодействия в материалах исследуемых систем, проведении вычислений в широко распространённом коде LAMMPS. Также можно отметить, что рассчитанная в постановочных расчетах энергия связи Si-Si хорошо согласуется с аналогичной характеристикой из литературных данных.

Достоверность и новизна научных положений, выводов и рекомендаций. Научная новизна работы заключается в разработке комплекса методов, позволяющих исследовать динамические процессы в двухмерных материалах, а именно: автором была разработана модель, имитирующая поступление лития в двухмерный кремниевый канал с последующим его свободным размещением. Автором также был предложен адаптированный под двухмерные структуры метод расчета компонент тензора напряжений.

Личный вклад соискателя в разработку научной проблемы. Основываясь на списке работ, опубликованных автором, Абрамова К.А. достаточно интенсивно занимается исследованиями в области моделирования наносистем. Тематика научных трудов полностью соответствует теме диссертационной работы. Личный вклад автора выражается в участии во всех этапах работы от постановки задач, планирования и выполнения компьютерного эксперимента, до анализа, интерпретации данных и их представления в форме докладов и статей.

Материал диссертации последовательно представлен в пяти главах. **Так в первой главе** выполнен литературный обзор, охватывающий как существующие на сегодняшний день работы, посвященные получению двухмерного кремния, так и работы по моделированию схожих с представленными в диссертации систем. **Во второй главе** обсуждается метод молекуллярной динамики и его адаптация под исследуемые в работе системы, с учетом особенностей моделирования двухмерных структур и их взаимодействия с поступающим извне литием. Также в главе уделено внимание описанию методов контроля температуры, представлена структура силицина, а также приведен общий вид и характеристики исследуемой системы. В данном разделе также описываются процедуры интеркаляции и деинтеркаляции лития в силиценовый канал и их реализации в среде кода

LAMMPS. В третьей главе обсуждаются полученные автором энергетические и кинетические характеристики литиевой подсистемы, также определяется влияние дефектов на устойчивость силиценовых листов. Четвертая глава посвящена исследованию локальной структуры упаковок лития, формирующихся в силиценовом канале в процессе интеркаляции. Путем построения многогранников Вороного были получены гистограммы распределений, которые отражают наиболее вероятные угловые распределения, формирующихся вокруг центрального лития структур, а также наиболее вероятное количество соседей в таких структурах. В пятой главе автор приводит результаты расчета напряжений, возникающих в силицене при его предельном заполнении литием, проводится исследование такой характеристики на различных этапах заполненности канала литием, также в главе описывается методика расчета компонент тензора напряжений в силицене. Автор отмечает, что наибольшие напряжения развиваются в силицене, расположенном на медной подложке, причем силицен должен включать крупные дефекты, в случае гексавакансии силицен на данном типе подложке разрушается. И в заключении автор приводит результаты и выводы по работе с достижением эффективных ёмкостных и механических характеристик созданных композитов не только «никелевая подложка – силицен», но и альтернативная система «медная подложка – силицен» с предельным количеством интеркалированного лития с учетом, что в 2D-кремнии отсутствуют вышеуказанные крупные дефекты.

Соответствие диссертации и автореферата требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней - основные положения диссертации изложены в 10 публикациях в изданиях, включенных в перечень ВАК. Материалы диссертации были представлены и обсуждены на отечественных конференциях и конференциях с международным участием начиная с 2017 года.

Вопросы и замечания

Диссертация и автореферат изложены логично с необходимым количеством публикаций. Автореферат отражает содержание диссертации, тема которой соответствует заявленной научной специальности. При ознакомлении с содержанием работы возник ряд вопросов и замечаний:

1. Чем вы можете обосновать увеличенное расстояние между листами силицина в представленной модели?
2. Оправдана ли фиксация силиценовых листов по периметру - и не является ли это основным вкладом в искажение рельефа силиценового канала при моделировании?
3. Объясните введение разнородного потенциального взаимодействия в листах силицина и между листами силицина.
4. В качестве пожелания для дальнейшего расширения темы исследования и уточнения полученных результатов хотелось бы порекомендовать включение новейших методов компьютерного моделирования (DFT) с применением нейросетевого прогнозирования потенциалов межатомных взаимодействий взамен полуэмпирических потенциалов (как на примере расшифровки генома). Так что воспроизведенные потенциалы на основе нейросетевой подборки дескрипторов возможно выполнить классическим МД-моделированием с подобной точностью *ab initio* (с прогнозируемым числом частиц $\sim 10^5\text{-}10^7$ атомов) в системах и высокой производительностью расчетов практически всех требуемых характеристик изучаемого материала.

Заключение

Указанные замечания не снижают общего положительного впечатления от представленной диссертационной работы и носят в значительной степени характер пожеланий и рекомендаций для развития данной тематики как автором работы, так и его коллегами. Включенные публикации и автореферат полно отражают содержание диссертационной работы.

Таким образом, можно сделать вывод о том, по объему и уровню выполненных исследований, научной и практической значимости полученных результатов диссертационная работа Абрамовой К.А. в полной мере удовлетворяет требованиямп.9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ и ее автор заслуживает присуждение ему ученой степени кандидат физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Официальный оппонент,
Полухин Валерий Анатольевич
доктор физико-математических наук по специальности 1.4.4. («Физическая
химия»)
ФГБУН Институт metallurgии
Уральского отделения Российской академии наук
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101
ведущий научный сотрудник лаборатории гетерогенных процессов
тел:(343) 267-91-24
e-mail: p.valery47@yandex.ru

« 21 » марта 2023 года

Подпись в.н.с., д.ф.-м.н. Полухина В.А. подтверждаю

Ученый секретарь ст.н.с., к.х.н.

Долматова А.В.

