

ОТЗЫВ

на автореферат 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»

В автореферате диссертационной работы Абрамовой К.А. представлены результаты молекулярно-динамического моделирования, описывающие поведение тонкопленочного силиценового анода для литий-ионных батарей при его зарядке и разрядке. Тема диссертации является актуальной, поскольку раскрывает вопросы применения инструментов компьютерного моделирования при описании процессов, протекающих в наноразмерных системах при их практическом применении. Кроме того, в работе уделено большое внимание исследованию структурных трансформаций, происходящих в исследуемых системах при их литизации. Структура, объем и содержание диссертации отвечают всем установленным требованиям. Применяемые методы расчета являются хорошо апробированными в области атомистического моделирования наноструктур.

При ознакомлении с содержанием автореферата возникли следующие вопросы и замечания:

1. В диссертации для именования двух силиценовых монослоев в упаковке Бернала был использован термин «двуслойный силицен». Однако использование этого термина не является корректным, так как в научной литературе под двухслойным (bilayer) силиценом принято понимать два ковалентно связанных монослоя силицина.
2. На рисунке 8 приведен фрагмент структуры двух силиценовых монослоев с ионом Li⁺, в котором имеется два топологических дефекта с 5-членными циклами. Как появляются эти топологические дефекты в силиценовом канале?
3. В автореферате имеется несколько незначительных опечаток. Например, в 4-м выводе на странице 19 указано «даухслойный силицен».

Данные замечания имеют уточняющий характер и не подвергают сомнению результаты, полученные автором, и не снижают ценность работы. По объему и уровню выполненных исследований, научной и практической значимости полученных результатов диссертационная работа К.А. Абрамовой удовлетворяет требованиям пункта 9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ, а ее автор, Абрамова Ксения Андреевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – «Физическая химия».

Кандидат физико-математических наук, доцент кафедры физики конденсированного состояния ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет»

 / Грешняков Владимир Андреевич

Адрес: 454001, г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129

E-mail: greshnyakov@csu.ru

Тел: +7(351)7997117

Подпись В.А. Грешнякова заверяю:

14.03.2023

