

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 настоящее время одна из ключевых задач материаловедения – это создание надежных, долговечных и высокомощных устройств накопления и хранения энергии. К таким устройствам относятся литий-ионный аккумуляторы, поиск материалов для которых – важная теоретическая и прикладная задача. Высокая заинтересованность научного сообщества физико-химическими свойствами двухмерных материалов и возможностью их получения, дает вектор развития, нацеленный на разработку и апробацию композиционных электродов, выполненных на основе двухмерных структур. Новизна темы исследования и сложность постановки эксперимента по получению таких структур предполагают широкое применение методов компьютерного моделирования для изучения поведения соответствующих двумерных материалов.

В связи с этим, диссертационное исследование К.А. Абрамовой, посвященное изучению свойств бездефектного и дефектного бислоев силицина как перспективного материала для литий-ионных аккумуляторов, представляется актуальным.

К основным достоинствам работы можно отнести создание модели, имитирующей динамический процесс интеркаляции и деинтеркаляции лития в двухслойный композиционный анод, выполненный из силицина.

Автореферат диссертации Абрамовой К.А. содержит в себе все основные элементы, которые предъявляются к квалификационным работам на соискание ученой степени кандидата наук. В нем отражена актуальность, новизна и значимость, а также приведены основные выводы, полученные в результате работы с моделью. В ходе прочтения работы возникли следующие вопросы и замечания.

1. Каково критически допустимое изменение объема анода при литизации/делитизации? В Табл. 1 минимальное полученное значение превышало 2,2%, а в большинстве случаев изменение объема было много больше. Как полученные результаты соотносятся с характеристиками существующих анодов?
2. Как автор может объяснить тот результат, что для случая алюминиевой подложки при переходе от моно- к би-вакансиям предельное содержание лития увеличивается, а при переходе к три-вакансиям – уменьшается (рисунки 4 и 5)?
3. В тексте автореферата не обсуждается зависимость полученных результатов от концентрации дефектов. Изучалась ли она?
4. Последний вывод «С точки зрения сохранения механической прочности при циклировании также удачным исполнением анода является двухслойный силицин, размещенный на дефектной серебряной подложке» вызывает вопросы, так как про дефекты подложки в автореферате не говорится.

5. В тексте автореферата присутствуют опечатки и неточности, затрудняющие понимание: на рис. 3 отсутствует легенда; на рис. 9 неясно, для какой из подложек приведены результаты; на стр. 8 требует уточнения формулировка «геометрически оптимизировалась».

Указанные вопросы имеют уточняющий характер, не подвергают сомнению результаты, полученные автором, и не снижают ценность работы.

Считаем, что диссертационная работа удовлетворяет требованиям п.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
(специальность 1.3.8 – физика
конденсированного состояния), доцент
доцент кафедры физики наноразмерных систем,
Институт естественных и точных наук,
Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего
образования «Южно-Уральский
государственный университет (национальный
исследовательский университет)».

454080, г. Челябинск, пр. Ленина д. 76, ауд. 245
Тел.: 8(351)2679023;
e-mail: sozykinsa@susu.ru

кандидат физико-математических наук
(специальность 1.3.8 – физика
конденсированного состояния),
ассистент кафедры физики наноразмерных
систем, Институт естественных и точных наук,
Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего
образования «Южно-Уральский
государственный университет (национальный
исследовательский университет)».

454080, г. Челябинск, пр. Ленина д. 76, ауд. 245
Тел.: 8(351)2679023;
e-mail: anikinaev@susu.ru

Созыкин Сергей Анатольевич
13.03.2023

Аникина Екатерина Владимировна
13.03.2023

