

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы 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 диссертационной работе Абрамовой К.А. выполнено компьютерное моделирование, имитирующее процессы, протекающие в анодной области литий-ионного аккумулятора. Данные, приведенные в литературном обзоре диссертации, свидетельствуют, что двухмерные наноструктуры обладают преимуществами перед традиционными материалами ввиду своих уникальных прочностных и электронных характеристик. Актуальность работы диктуется именно этими соображениями. Помимо всего прочего, оригинальность работы заключается в создании специальной молекулярно-динамической модели, описывающей процессы литизации/делитизации в силиценовых анодах с кремний-металлическими компонентами. Важным результатом работы является разработка метода исследования локальной структуры двухмерного материала посредством построения многогранника Вороного вокруг движущегося по каналу иона лития. Такая оценка позволяет проанализировать внутренний рельеф двухмерного канала и проводить оценку влияния подложки и дефектов, присутствующих в стенках канала на величину деформаций, вызванных контактом материала с литием. Практическая значимость работы обусловлена разработкой метода, позволяющего проводить динамическую оценку работоспособности конструкции электрода, выполненного на основе композитного материала, включающего двухмерную структуру. Обобщение результатов диссертационного исследования на использование других носителей заряда (Na^+ , K^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} и Al^{3+}) может оказаться весьма полезным продолжением данной работы.

В качестве замечания на автореферат отметим присутствие грамматических ошибок в тексте. Кроме того, из автореферата не понятно, какое расстояние между силиценовыми листами было реализовано в модели. Последнее замечание имеет исключительно поясняющий характер и не снижает ценность работы.

Достоверность полученных результатов подтверждается правильным применением методов компьютерного моделирования с адекватным выбором уровня теории для решаемых задач, сравнением с результатами независимых работ, а также с экспериментальными данными. Результаты диссертации изложены в ведущих

отечественных и зарубежных журналах, докладывались на международных и всероссийских конференциях. Автореферат написан логично, доказательно, ясным научным языком.

На основании вышеизложенного, считаю, что диссертационная работа Абрамовой К.А. «Компьютерное моделирование литизации/делитизации силиценового анода для литий-ионных батарей», представленная на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, 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».

Доктор физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния, доцент, профессор Института нанотехнологий в электронике, спинtronике и фотонике ФГАОУ ВО Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» (НИЯУ МИФИ)

115409, г. Москва, Каширское шоссе, 31

E-mail: Mike.Maslov@gmail.com;

Тел.: +7 (495) 788-56-99

Маслов Михаил Михайлович
1

Маслов
10.03.2023г.

Подпись у
Заместитель начальника
документации
НИЯУ

В.М.са

