

Отзыв

официального оппонента на диссертационную работу Михалёвой Н.С. «Моделирование сорбции и диффузии лития в материалах на основе α -плоскости бора, BC_3 и кремния», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

В настоящее время литий-ионные аккумуляторы занимают лидирующую позицию среди источников тока для портативных устройств. Такого типа аккумуляторы характеризуются значительной удельной емкостью, высокой эффективностью и продолжительным сроком службы. Однако расширение области применения литий-ионных аккумуляторов влечет за собой рост требований, предъявляемых к характеристикам электродных материалов. Графит, используемый в качестве анода уже на протяжении долгого времени, обладает ограниченной удельной емкостью 372 мАч/г и требует замены. Это приводит к необходимости исследования новых активных материалов анода, а также возможности усовершенствования известных материалов путем их модификации. Таким образом, исследование ионных проводников на основе BC_3 , α -плоскости бора и Si с целью оценки перспективности применения их в литиевых источниках тока, представленное в диссертационной работе, является **актуальным**.

Достоверность полученных в работе результатов обусловлена использованием надежного квантово-химического пакета VASP, многократно апробированного и широко применяемого для расчета твердых тел и дающего адекватные результаты для аналогичных систем; выбором физически обоснованных моделей; сопоставлением полученных результатов с экспериментальными и теоретическими данными других авторов.

Научная новизна. Впервые изучены сорбция и диффузия лития в материалах на основе BC_3 и α -плоскости бора, а также в ряде их интеркалатов. Исследовано влияние степени заполнения поверхности

кремния(100) литием и наличие примесных атомов на величину энергетического барьера лимитирующей стадии (диффузия лития с поверхности в объем).

Практическая значимость диссертационной работы заключается в теоретическом предсказании структуры и свойств соединений, которые могут послужить основой для экспериментальных исследований, посвященных разработке новых высокоэффективных анодных материалов.

Диссертация состоит из введения, трех глав, выводов и списка литературы из 216 наименований. Объем диссертации составляет 105 страниц, в том числе 21 рисунок и 12 таблиц.

Во введении дается краткая справка об актуальности темы диссертации, сформулированы цели, научная новизна и практическая значимость исследований, приведены основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе проведен анализ литературы, посвященной изучению различных материалов анода литий-ионных аккумуляторов. В ходе обсуждения описываются преимущества и недостатки различных материалов. В целом обзор достаточно полно отражает современное состояние проблемы, касающейся материалов анода литий-ионных аккумуляторов, и обосновывает актуальность проведенных в диссертации исследований.

Во второй главе приведено обоснование теоретических методов численного моделирования, выбранных для исследуемых структур. Изложены основные принципы, преимущества и недостатки теории функционала плотности с применением обобщенного градиентного приближения, псевдопотенциала Вандербильта и PAW потенциала. Последний раздел этой главы посвящен описанию метода, используемого для нахождения переходного состояния и энергетических барьеров перехода.

В третьей главе, основной главе диссертации, приведены основные результаты моделирования сорбции и диффузии в BC_3 , α -плоскости бора и

кремния. Изучено влияние концентрации адсорбированного лития на поверхности кремния (100) на величину энергетического барьера перехода лития с поверхности в приповерхностные слои. Обнаружено, что в результате накопления лития на Si (100) за счет уменьшения энергетической стабильности поверхностного состояния по сравнению с приповерхностным происходит уменьшение энергетического барьера прямого перехода с поверхности в объем по отношению к обратному. Показано влияние допантов с концентрацией 0,3 атомных % на энергию связи лития с поверхностью допированного кремния (100) и величину энергетических барьеров перехода. Исследована зависимость энергетической стабильности интеркалированных соединений на основе α -плоскости бора и BC_3 от концентрации накопленного лития, а также изучена подвижность атомов лития в них. Все исследуемые интеркалированные соединения энергетически стабильны и являются перспективными для применения в литиевых источниках тока.

В заключительной части диссертации перечисляются основные результаты и выводы, отражающие многоплановость и большой объем проделанной работы.

В целом, можно отметить, что научное значение диссертационной работы, а в связи с этим и заслуга Н.С. Михалёвой заключается в проведении моделирования процессов сорбции и диффузии лития в материалах потенциально пригодных для использования в литиевых источниках тока, что позволяет оценить перспективы их практического применения.

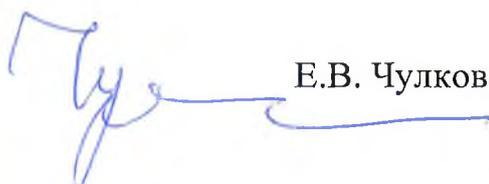
Однако диссертационная работа Н.С. Михалёвой не лишена недостатков. Влияния степени заполнения поверхности кремния литием на величины энергетических барьеров перехода с поверхности в приповерхностный слой не имеет четкого объяснения. Хотелось бы знать, за счет чего происходят те или иные изменения энергетических барьеров перехода лития. Также отсутствует характеристика проявляемой роли допантов на параметры сорбции и диффузии лития на поверхности и в

приповерхностных слоях кремния. В работе показано, что существуют два конкурирующих пути перехода лития с поверхности в приповерхностный слой кремния, при этом в случае допирования одиночным атомом В, Ga или Ge происходит уменьшение одного из энергетических барьеров (ТЗ-УН). Поэтому было бы интересно узнать, что произойдет в случае с большей концентрацией допанта на поверхности кремния, как сильно измениться величина этого энергетического барьера перехода лития.

Сделанные замечания не изменяют общей положительной оценки диссертации, являющейся законченной научно-квалифицированной работой. Результаты исследований Н.С. Михалёвой своевременно опубликованы в ведущих научных журналах и докладывались на различного уровня конференциях. Содержание автореферата в полной мере соответствует содержанию диссертации.

Диссертационная работа Н.С. Михалёвой выполнена на высоком научно-теоретическом уровне, отвечает всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Ведущий научный сотрудник лаборатории
наноструктурных поверхностей и покрытий
ФГАОУ ВО Национальный исследовательский
Томский государственный университет
доктор физ.-мат. наук, профессор

 Е.В. Чулков

Контактные данные: г. Томск, пр. Ленина 36, 2-ой учебный корпус ТГУ, ком.
135а, тел. 52-98-44, tmckp@yandex.ru

Докторская диссертация защищена по специальности 01.04.07 – физика
конденсированного состояния

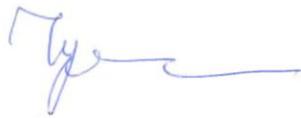
   ЗАМ. НАЧ.
УДМО
М.Б. УДАЛОВА

СПИСОК
опубликованных научных и учебно-методических работ
Евгения Владимировича Чулкова
за последние 5 лет

| № п/п | Наименование работы | Вид работы | Выходные данные | Соавторы |
|-------|--|------------|--|--|
| 1 | Изменение поверхностных состояний в тонких пленках Ag(111) при адсорбировании монослоя органических молекул PTCA | статья | Журнал экспериментальной и теоретической физики – 2010. – Т. 137, № 1, с. 129-135. | Зайцев Н.Л., Нечаев И. А. |
| 2 | Modification of response properties of the Be(0001) surface upon adsorption of a potassium monolayer: An ab-initio calculation | статья | Physica Status Solidi B. – 2010. – Vol.247, n.8. – pp. 1849-1857 | Silkin V.M., Echeverry J.P., Echenique P.M. |
| 3 | Self-consistent approach for spectral properties of single alkali adatoms on Cu(111) | статья | Phys. Rev. B. – 2012. – Vol.85. – P. 045408 | Achilli S., Trioni M. |
| 4 | Comparative study of vibrations in submonolayer structures of potassium on Pt(111) | статья | J. Phys.: Cond. Matter. – 2012. – Vol.24. – P. 104003 | Rusina G.G., Eremeev S.V., Borisova S.D. |
| 5 | Динамика процессов электрон-дырочной рекомбинации и захвата носителей в анатазе, легированном бором, углеродом или азотом | статья | Физика твердого тела – 2013. – Т. 55, вып. 9. – с. 1697-1705 | Жуков В.П. |
| 6 | Фононы на поверхностях металлов и в адсорбционных структурах | статья | Успехи химии – 2013. – № 82. – с.483. | Русина Г.Г. |
| 7 | Ab initio study of low-energy collective electronic excitations in bulk Pb | статья | Phys. Rev. B. – 2013. – Vol.87. – P. 115112 | Zubizarreta X., Silkin V.M. |
| 8 | Vibrational spectroscopy and theory of alkali metal adsorption and co-adsorption on single-crystal surfaces | статья | Surface Science Reports. – 2014. – Vol.68. – pp. 305-389 | Politano A., Chiarello G., Benedek G., Echenique P.M. |

| | | | | |
|----|---|--------|--|--|
| 9 | Role of surface passivation in the formation of Dirac states at polar surfaces of topological crystalline insulators: The case of SnTe(111) | статья | Phys. Rev. B. – 2014. – Vol. 89. – P. 165424 | Eremeev S.V., Koroteev Yu.M., Nechaev I.A. |
| 10 | Unoccupied electronic structure and relaxation dynamics of Pb/Si(111) | статья | Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena. – 2014. – Vol.195. – pp. 278-284 | Sandhofer M., Sharma V., Sklyadneva I.Yu., Miksic-Trontl V., Zhou P., Ligges M., Heid R., Bohnen K.-P., Bovensiepen U. |

Ведущий научный сотрудник лаборатории наноструктурных поверхностей и покрытий
 ФГАОУ ВО Национальный исследовательский
 Томский государственный университет
 доктор физ.-мат. наук, профессор



Е.В. Чулков

Список верен:



ЗАМ. НАЧ.
 УДИОО
 М.Б. УДАЛОВА

«6» октября 2014