

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Михалёвой Натальи Сергеевны «Моделирование сорбции и диффузии лития в материалах на основе α -плоскости бора, BC_3 и кремния», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «физика конденсированного состояния».

Тенденции развития современной промышленности требуют решения задач накопления, хранения и преобразования электрической энергии. Поэтому актуальность диссертационная работа Михалёвой Н.С., посвященной моделированию ионных проводников на основе слоистых гексагональных структур и поверхности кремния, не вызывает сомнений.

Судя по автореферату, в диссертации последовательно исследованы процессы сорбции и диффузии лития в α -плоскости бора, BC_3 и Si (100). При выполнении работы проведено построение и выполнены расчёты большого числа модельных структур с различным расположением атомов лития и различной степенью заполнения поверхности. Определены барьеры миграции атомов лития с поверхности в приповерхностные слои Si (100), выявлено влияние допирования поверхности Si (100) бором, галлием и германием на параметры сорбционных и диффузионных процессов, найдены зависимости энергии образования интеркалированных соединений на основе α -плоскости бора и BC_3 от массовой доли внедренного лития и зависимости величин энергетических барьеров от пути миграции лития в α -плоскости бора и BC_3 .

К работе имеется ряд вопросов и замечаний:

1. Для моделирования процессов, протекающих на аноде литий-ионного аккумулятора, в работе рассматривались взаимодействия между электрически нейтральной поверхностью электрода и атомами лития. В автореферате не обсуждаются возможные эффекты, связанные с учетом кулоновских сил между заряженными системами.
2. С чем связан выбор бора, галлия и германия в качестве допантов для поверхности Si (100)? При какой минимальной концентрации допантов можно ожидать заметного увеличения скорости диффузии лития с поверхности кремния в объём?
3. Не понятен механизм изменения укладки слоев BC_3 при изменении концентрации интеркалированного лития.

Высказанные вопросы и замечания не снижают общей положительной оценки диссертационной работы. Работа написана на высоком уровне и является законченной научной работой, достоверность полученных результатов не вызывает сомнений и обусловлена использованием проверенных современных расчётных методов.

Судя по автореферату, объёму проведенных исследований, основным результатам, новизне и практической значимости, работа отвечает всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а её автор, Михалёва Наталья Сергеевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «физика конденсированного состояния».

Научный сотрудник лаборатории
физикохимии наноматериалов ИНХ СО РАН
к.ф.-м.н.

Подпись *Седельникова О.В.*
заверяю *С*
Ученый секретарь ИНХ СО РАН
"01" октября 2014 г.

СВ
Седельникова О.В.
тел. +7 (383)3309490,
o.sedelnikova@gmail.com
пр-кт. Академика Лаврентьева, 3
Новосибирск, 630090, Россия