

## ОТЗЫВ на автореферат диссертации

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

Анализ автореферата диссертации позволяет сделать вывод о том, что теоретическое исследование сорбции и диффузии лития в материалах на основе  $\alpha$ -плоскости бора,  $BC_3$  и кремния (100) может послужить ориентиром дальнейшим экспериментальным работам, посвященным разработке новых анодных материалов литий-ионных аккумуляторов. Фундаментальная ценность выбранного направления исследований несомненна, и работа представляет большой научный интерес.

Автор корректно использует для расчетов известные квантово-химические методы, поэтому все результаты являются достоверными. Среди значимых и принципиально новых полученных результатов стоит отметить:

- накопление лития на поверхности является причиной его медленной диффузии в объем кремния;
- модифицирование поверхности кремния (100) бором, галлием и германием при концентрации допанта 0,3 атомных % не решает проблему медленной диффузии лития через поверхность (100) в объем;
- Возможность использования интеркалированных литием соединений на основе  $\alpha$ -плоскости бора и  $BC_3$  ввиду их энергетической стабильности и низких сопоставимых с графитом величин энергетических барьеров перехода лития в них.

Автореферат достаточно полно отражает суть исследования. Однако в нем в конкретном исследовании желательно было приводить ссылки на опубликованную работу автора.

Следует отметить достаточно полную апробацию результатов диссертационной работы: по теме исследования опубликовано 18 работ, из них 6 – статей в реферируемых журналах из перечня ВАК РФ.

Считаю, что диссертационная работа Михалёвой Натальи Сергеевны соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «физика конденсированного состояния».

01.10.2014

Д.ф.-м.н, профессор, главный научный сотрудник

Института биохимической физики РАН

119334 Москва, Косыгина ул. 4,

т. 8-495-939-71-72

chern@sky.chph.ras.ru

Л.А. Чернозатонский

Собственноручную подпись  
сотрудника *Л.А. Чернозатонский*  
удостоверяю *З.И. Виноградова*

