

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».

Работа Михалевой Н.С. посвящена теоретическому описанию процессов сорбции и диффузии лития в α -плоскости бора, BC_3 и кремнии, что может способствовать ускорению процессов улучшения и поиска новых литий-ионных проводников. Решение указанной проблемы позволяет объективно оценить перспективность применения исследуемых материалов в литиевых источниках тока еще до начала экспериментальных исследований. В связи с этим, большое научное и практическое значение приобретает определение влияния различных факторов на параметры сорбции и диффузии лития.

В работе при проведении оценки влияния степени заполнения поверхности литием и допирования поверхности Si (100) на параметры сорбционных и диффузионных процессов автором установлено, что накопления лития на поверхности кремния является причиной его медленной диффузии в объем кремния, а допирование поверхности атомами В, Ga и Ge, когда их концентрация равна 0,3 атомных процента, не оказывает существенного влияния. В ходе исследования энергетической стабильности интеркалированных литием соединений BC_3 обнаружено, что при достижении концентраций лития 3,59–1,83 % в BC_3 происходит переход от структуры со сдвинутыми слоями к структуре без сдвига. Для интеркалированных литием соединений BC_3 и α -плоскости бора установлено, что все они являются стабильными и характеризуются низкими энергетическими барьерами перехода лития, что говорит о перспективности применения данных материалов в качестве литий-ионных проводников.

Работа представляется актуальной, выполнена в полном объеме на достаточном научном уровне. Основные результаты диссертации

опубликованы в журналах, входящих в перечень ВАК РФ. Материалы диссертации неоднократно докладывались на международных и всероссийских конференциях.

В качества пожеланий к работе хотелось бы отметить необходимость большей однозначности в формулировках. Кроме этого на рисунке 1, автореферата диссертации, при представлении расположения атомов лития на поверхности и приповерхностном слое Si (100), для поперечного представления нет обозначения поверхности структуры. Только из рассмотрения результатов, представляемых по тексту и в таблице 1, можно сделать предположение какие из атомов находятся на поверхности.

В целом работа удовлетворяет требованиям ВАК, а ее автор Михалёва Наталья Сергеевна заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «физика конденсированного состояния».

Канд.хим.наук, доцент кафедры
физической и неорганической химии

Института цветных металлов и материаловедения СФУ

т. +79050878981, E-mail: Ashubin@sfu-kras.ru

Почтовый адрес: 660041, Красноярск, пр.Свободный 79, СФУ

А.А. Шубин

