

**РЕШЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА УрФУ 1.4.01.01  
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ  
КАНДИДАТА НАУК**

от «30» марта 2023 г. № 5

о присуждении **Абрамовой Ксении Андреевны**, гражданство Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «**Компьютерное моделирование литизации/делитизации силицевого анода для литий-ионных батарей**» по специальности **1.4.4. Физическая химия** принята к защите диссертационным советом УрФУ 1.4.01.01 14 февраля 2023 г. протокол № 2.

Соискатель, **Абрамова Ксения Андреевна**, 1992 года рождения, в 2016 г. окончила ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по специальности 140303 Физика кинетических явлений; в 2020 году окончила очную аспирантуру ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН 04.06.01 Химические науки (Физическая химия); работает в должности младшего научного сотрудника лаборатории электрокристаллизации и высокотемпературной гальванотехники ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН (г. Екатеринбург).

Диссертация выполнена в лаборатории электрокристаллизации и высокотемпературной гальванотехники ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник **Галашев Александр Евгеньевич**, ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, лаборатория электродных процессов, главный научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

**Баимова Юлия Айдаровна**, доктор физико-математических наук, профессор РАН, ФГБУН Институт проблем сверхпластичности металлов РАН (г. Уфа), лаборатория физики и механики углеродных наноматериалов, заведующий;

**Купряжкин Анатолий Яковлевич**, доктор физико-математических наук, профессор, ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» (г. Екатеринбург), учебно-научная лаборатория ЯМР и масспектрометрии кафедры технической физики, заведующий;

**Полухин Валерий Анатольевич**, доктор физико-математических наук, ФГБУН Институт металлургии УрО РАН (г. Екатеринбург), лаборатория гетерогенных процессов, ведущий научный сотрудник

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 16 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации – 16 работ, из них 10 статей, опубликованных в рецензируемых научных журналах ВАК РФ и индексируемых в международные реферативные базы данных, и системы цитирования Scopus и WoS. Общий объем опубликованных работ по теме диссертации 5.19 п.л. / 2.38 п.л. – авторский вклад.

*Статьи, опубликованные в рецензируемых научных журналах и изданиях, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ:*

1. Galashev, A.Y. Nanoscale simulation of the lithium ion interaction with defective silicene / A.Y. Galashev, **К.А. Ivanichkina (Abramova)** // Phys. Lett. A. – 2017. – V.381. – N. 36. – P. 3079-3083; 0.313 п.л. / 0.156 п.л. (WoS, Scopus)

2. Галашев, А.Е. Структура и устойчивость дефектного силицена на подложках Ag(001) и Ag(111). Компьютерный эксперимент. / А.Е. Галашев, О.Р. Рахманова, **К.А. Иваничкина (Абрамова)**, А.С. Воробьев // ФТТ. – 2017. – Т.59. – № 6. – С. 1218-1227; 0.625 п.л. / 0.156 п.л.

Galashev, A.E. Structure and stability of defective silicene on Ag(001) and Ag(111) substrates: a computer experiment / A.E. Galashev, **К.А. Ivanichkina (Abramova)**, A.S. Vorob'ev, O.R. Rakhmanova // Phys. Solid State. – 2017. – V. 59. – N. 6. – P. 1242-1252. (WoS, Scopus)

3. Galashev, A.Y. Computer study of atomic mechanisms of intercalation/deintercalation of Li ions in a silicene anode on an Ag (111) substrate / A.Y. Galashev, **K.A. Ivanichkina (Abramova)** // J. Electrochem. Soc. – 2018. – V. 165. – N.9. – P. A1788-A1796; 0.563 п.л. / 0.282 п.л. (WoS, Scopus)
4. Galashev, A.Y. Physical aspects of the lithium ion interaction with the imperfect silicene located on a silver substrate / A.Y. Galashev, O.R. Rakhmanova, **K.A. Ivanichkina (Abramova)**, Yu. P. Zaikov // Letters on Materials. – 2018. – V. 8. – N. 4. – P. 463-467; 0.313 п.л. / 0.0939 п.л. (WoS, Scopus)
5. Galashev, A.Y. Computer test of a new silicene anode for lithium-ion battery / A.Y. Galashev, **K.A. Ivanichkina (Abramova)** // ChemElectroChem. – 2019. – V. 6. – N. 5. – P. 1525-1535; 0.688 п.л. / 0.344 п.л. (WoS, Scopus)
6. Galashev, A.Y. Computational investigation of a promising Si-Cu anode material / A.Y. Galashev, **K.A. Ivanichkina (Abramova)** // PCCP. – 2019. – V. 21. – N. 23. – P. 12310-12320; 0.688 п.л. / 0.344 п.л. (WoS, Scopus)
7. Галашев, А.Е. Компьютерное изучение процессов литиевой интеркаляции и деинтеркаляции в силициновом канале / А.Е. Галашев, **К.А. Иваничкина (Абрамова)** // ЖФХ. – 2019. – Т. 93. – № 4. – С. 601-606; 0.375 п.л. / 0.188 п.л.  
Galashev, A.E. Computer modeling of lithium intercalation and deintercalation in a silicene channel / A.E. Galashev, **K.A. Ivanichkina (Abramova)** // Russ. J. Phys. Chem. A. – 2019. – V. 93. – N. 4. – P. 765-769 (Scopus, WoS)
8. Галашев, А.Е. Компьютерное исследование применимости силицена в электрохимических устройствах / А.Е. Галашев, **К.А. Иваничкина (Абрамова)** // ЖСХ. – 2020. – Т. 61. – № 4. – С. 691-700; 0.625 п.л. / 0.313 п.л.  
Galashev, A.E. Computer study of silicene applicability in electrochemical devices / A.E. Galashev, **K.A. Ivanichkina (Abramova)** // J. Str. Chem. – 2020. – V. 61. – N. 4. – P. 659-667; (WoS, Scopus)
9. Galashev, A.Y. Silicene anodes for lithium-ion batteries on metal substrates / A.Y. Galashev, **K.A. Ivanichkina (Abramova)** // J. Electrochem. Soc. – 2020. – V. 167. – N. 5. – P. 050510 (1-10); 0.625 п.л. / 0.313 п.л. (Scopus, WoS)

10. Галашев, А.Е. Компьютерное исследование структуры силицевого канала с помощью транспорта иона  $\text{Li}^+$  в нем / А.Е. Галашев, **К.А. Иваничкина (Абрамова)** // ЖФХ. – 2021. – Т.95. – № 4. – С. 562-567; 0.375 п.л. / 0.188 п.л.

Galashev, A.E. Computer study of silicene channel structure based on the transport of  $\text{Li}^+$  / А.Е. Galashev, **К.А. Ivanichkina (Abramova)** // Russ. J. Phys. Chem. A. – 2021. – V. 95. – N.4. – P.724-729. (Scopus, WoS)

На автореферат поступило 4 положительных отзывов: ведущего научного сотрудника лаборатории комплексных электрофизических исследований ФГБУН Института электрофизики УрО РАН, д.ф.-м.н. **Болтачева Грзя Шамилевича**, г. Екатеринбург; доцента кафедры физики конденсированного состояния ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет», к.ф.-м.н., **Грешнякова Владимира Андреевича**, г. Челябинск; доцента кафедры физики наноразмерных систем, Института естественных и точных наук ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет», к.ф.-м.н., доцента **Созыкина Сергея Анатольевича** и ассистента кафедры физики наноразмерных систем Института естественных и точных наук ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет», к.ф.-м.н. **Аникиной Екатерины Владимировны**, г. Челябинск; профессора Института нанотехнологий в электронике, спинтронике и фотонике ФГАОУ ВО Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» (НИЯУ МИФИ), д.ф.-м.н., доцента **Маслова Михаила Михайловича**, г. Москва.

Отзывы содержат следующие критические замечания и вопросы: о влиянии размерного эффекта и сделанных в модели допущениях на полученные результаты (Болтачев Г.Ш.); об уточнении результатов метода исследования локальной структуры силицевых листов, использованного в работе (Грешняков В.А.); об объемном расширении силицевых каналов в результате их литирования; о влиянии дефектов на предельное содержание лития в силицевом канале (Созыкин С.А., Аникина Е.В.); об уточнении геометрических характеристик исследуемой системы (Маслов М.М.).

**Выбор официальных оппонентов** обосновывается компетентностью Баимовой Ю.А., Купряжкина А.Я., Полухина В.А. в области физической химии, а именно их научными достижениями при изучении физико-химических свойств низкоразмерных систем и процессов, протекающих в таких системах, методами компьютерного моделирования, в том числе с применением молекулярной динамики, что подтверждается публикациями в высокорейтинговых научных журналах.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата **физико-математических** наук соответствует требованиям п.9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ и является научно-квалификационной работой, в которой, на основании выполненных автором исследований, содержится решение задачи по разработке компьютерной модели, отражающей структурные изменения, сопровождающие физико-химический процесс литизации и делитизации анодного материала, что имеет весомое значения для развития физической химии в рамках подходов компьютерного моделирования.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат **новые научные результаты** и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

– В рамках метода молекулярной динамики получена компьютерная модель, показывающая динамическую картину распределения лития внутри двухслойного силицевого канала, расположенного на различных металлических подложках (Ag, Ni, Cu, Al), установлено, что на распределение преимущественное влияние оказывают внутренний рельеф канала и поступающие извне ионы  $Li^+$ .

– Доказано, что материал подложки оказывает влияние на подвижность лития в силицевом канале; наибольшее значение самодиффузии  $Li$  достигается в системе «силицен-медная подложка», наименее подвижной оказывается  $Li$ -подсистема в силицевом канале, расположенном на алюминиевой подложке.

– Разработана общая методика исследования рельефа двумерных материалов с помощью «зондирующего» единичного иона, основанная на концепции многогранников Вороного.

– Рассчитаны компоненты тензора напряжений  $\sigma_{\alpha\gamma}$  для силиценовых листов при заполнении канала литием. Установлено, что наибольшие значения  $\sigma_{\alpha\gamma}$  достигаются в направлении нормали к стенкам силиценового канала, однако это не приводит к разрушению материала (за исключением системы на медной подложке с крупными дефектами).

– Установлено, что по мере укрупнения дефектов наиболее регулярное размещение лития вдоль силиценового канала сохраняется в системе на Ni- и Ag-подложках, что приводит к более равномерному распределению компонент тензора напряжений и определяет устойчивость системы даже при наличии значимых дефектов в силицене.

– На основе предложенной в диссертации молекулярно-динамической модели силиценового анода показано, что с точки зрения сохранения целостности силиценовых листов наилучшим является сочетание «силицен с моно- и бивакансиями – Ag-подложка», с точки зрения ёмкости по литию – «силицен с моновакансиями – Ni-подложка».

Диссертация является фундаментальным исследованием в области моделирования физико-химических процессов. В работе решены важные для развития физической химии двумерных материалов научные задачи: предложена компьютерная модель, имитирующая динамический процесс заполнения двумерного силиценового канала, на основании которой проведен многопараметрический анализ структурных и механических характеристик канала, показано влияние дефектов в различной концентрации на свойства композита «силицен – металлическая подложка» при его литизации. Предложенные варианты композитных материалов на основе двумерного кремния могут быть использованы при конструировании литий-ионных аккумуляторов.

На заседании 30 марта 2023 г. диссертационный совет УрФУ 1.4.01.01 принял решение присудить **Абрамовой К.А.** ученую степень кандидата **физико-математических наук.**

При проведении тайного голосования диссертационный совет УрФУ 1.4.01.01 в количестве 17 человек, из них 4 доктора наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 23 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 16, против – 1, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель диссертационного  
совета УрФУ 1.4.01.01

Черепанов  
Владимир Александрович

Ученый секретарь диссертационного  
совета УрФУ 1.4.01.01

Кочетова  
Надежда Александровна

30.03.2023