



Department of Chemistry  
University of Nevada, Reno  
Sergey A. Varganov  
Assistant Professor  
(775) 784-1406  
svarganov@unr.edu

### 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».

Диссертационная работа Михалёвой Н.С., как следует из материалов автореферата, посвящена исследованию ионных проводников на основе слоистых гексагональных структур ( $BC_3$ , борной  $\alpha$ -плоскости), а также чистой и допированной поверхности Si(100) с реконструкцией  $c(4 \times 2)$ . Энергетика и строение ионных проводников и их комплексов с литием изучена с использованием квантово-химических методов. На основе проведенных расчетов оценены возможности дальнейшего применения исследованных материалов в литиевых источниках тока.

Актуальность выбранной диссертантом темы не вызывает сомнений, поскольку литий-ионные аккумуляторы находят все большее применение в портативных устройствах.

Практическая ценность фундаментальных исследований, выполненных автором диссертации, заключается в использовании результатов данной работы при разработке новых литий-ионных проводников.

Среди наиболее значимых результатов работы хочется отметить следующие:

1) Обнаружено, что при достижении концентраций лития 1,8–3,6 % в  $BC_3$  происходит переход от структуры со сдвинутыми слоями к структуре без сдвига.

2) Установлено, что  $\alpha$ -плоскость бора и  $BC_3$  могут образовывать интеркалированные соединения с литием, при этом максимально достижимая концентрация лития значительно больше, чем в соединении графита  $LiC_6$ .

3) Обнаружено, что при достижении концентрации лития на поверхности в два монослоя энергетический барьер миграции лития с поверхности в объем Si(100) ниже по сравнению с барьером обратного процессом. Таким образом в этом случае преобладает диффузия Li в объем кремния.

4) Показано, что допирование Si(100) бором, галлием и германием не способствует ускорению лимитирующей стадии диффузии лития в объем кремния.

Необходимо отметить что результаты работы были опубликованы в российских и зарубежных журналах, включая высоко цитируемый Physical Review B.

В целом работа является законченным исследованием, достаточно апробирована, удовлетворяет требованиям ВАК предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Михалёва Наталья Сергеевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «физика конденсированного состояния».

С уважением,

Варганов С.А.

17/9/2014



Department of Chemistry/216  
University of Nevada, Reno  
Reno, NV 89557  
(775) 784-6041 office  
(775) 784-6804 fax  
www.chem.unr.edu