

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Кондратьевой Евгении

«Самодиффузия лития в металлических электродах», представленной на соискание
ученой степени кандидата химических наук по научной специальности 1.4.4.

Физическая химия

Диссертационная работа Евгении Кондратьевой представляет собой глубокое, многоаспектное и актуальное исследование, выполненное на стыке физической химии, материаловедения и вычислительного моделирования. Работа посвящена фундаментальной проблеме, лежащей в основе развития нового поколения химических источников тока с металлическим литиевым/натриевым анодом – неравномерному осаждению металла на поверхность электрода в процессе заряда. В работе всесторонне исследуются механизмы самодиффузии и массопереноса лития в металлических электродах, которые непосредственно определяют морфологическую стабильность поверхности и, как следствие, ёмкость, безопасность и долговечность перспективных литий-металлических аккумуляторов.

Научная ценность представленной работы заключается в успешной интеграции экспериментальных методик и современных методов компьютерного моделирования для создания целостной картины процессов, происходящих на атомарном уровне при электроосаждении лития. Автору впервые удалось экспериментально визуализировать и детально описать ключевой начальный этап планарного осаждения, связанный с внедрением ионов лития в наклонные границы зёрен у поверхности электрода. Особого внимания заслуживает элегантное экспериментальное доказательство центральной роли микроструктуры электрода: показано, что целенаправленное увеличение суммарной ёмкости границ зёрен путём легирования (на примере эвтектического сплава Li–Ga) позволяет в несколько раз продлить стадию компактного, безвисцерного осаждения. Этот практический вывод имеет непосредственное значение для разработки материалов электродов.

Теоретическая часть работы демонстрирует высокий уровень владения методами атомистического моделирования. С помощью молекулярной динамики с потенциалами, параметризованными методом машинного обучения, и расчётов в рамках теории функционала плотности получены количественные характеристики транспорта точечных дефектов в объёме лития и натрия, выявлена их аномальная температурная зависимость. Важным достижением является моделирование структуры и высокой диффузионной подвижности атомов на межзёренных границах. Большим преимуществом данной работы является моделирование транспорта лития на интерфейсе металл–оксид (Li–Li₂O), моделирующем межфазный слой SEI, неизбежно присутствующий на поверхности литиевых электродов. Установлено, что транспортные свойства этой границы сопоставимы с зернограничной диффузией, что подтверждает предложенный автором унифицированный механизм латерального переноса ионов лития к активным центрам осаждения.

Полученные результаты обладают высокой степенью достоверности, что подтверждается их внутренней согласованностью, соответствием литературным данным и публикацией основных положений работы в ряде авторитетных международных рецензируемых журналов. Изложение материала в автореферате логично, структурировано и отражает все этапы проведённого исследования – от постановки задачи до конкретных выводов и практических рекомендаций. Личный вклад соискателя в полученные результаты является определяющим и убедительно обоснован.

В целом, диссертационное исследование Евгении Кондратьевой является завершённой, новаторской научной работой, вносящей значительный вклад в понимание физико-химических основ работы металлических электродов. Результаты работы имеют фундаментальное значение для физической химии, а также открывают конкретные пути для прикладных инженерных решений в области создания высокоэнергоёмких и безопасных аккумуляторов. Автореферат полностью и адекватно отражает содержание диссертации, которая безусловно соответствует критериям, определенным пп. 2.1-2.5 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Автор отзыва

ФИО: Иноземцева Алина Игоревна

Ученая степень: кандидат химических наук

Ученое звание: –

Почтовый адрес: 119991, г. Москва, ул. Косыгина, 4

Телефон:

Адрес электронной почты: a.inozemtseva@chph.ras.ru

Место работы: Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова
Российской академии наук

Подразделение: лаборатория химических источников тока

Должность: старший научный сотрудник

27.01.2026

Иноземцева А. И.