

ОТЗЫВ

На автореферат диссертации Рыбакова Кирилла Сергеевича
«Моделирование функционального поведения материалов для металлоаккумулирующих систем», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности
1.4.4 Физическая химия

Тематика исследования диссертации является актуальной в наши дни в связи с повсеместным внедрением возобновляемых источников энергии и сопутствующей необходимостью энерго-аккумулирующих систем. Выбранный автором работы для исследования катодный материал LiCoVO₄, является перспективным материалом для ЛИА при устранении его недостатка – не высокой практической емкости в связи с высоким высоким значением рабочего потенциала заряда/разряда (4,2 В vs Li/Li⁺) и приемлемым значением теоретической емкости 148 мАч/г.

Цель работы сформулирована корректно, а поставленные задачи отражают последовательную логическую цепочку шагов для раскрытия проблематики исследования. Автором работы синтезирован материал для исследования и проведены электрохимические испытания включая базовый расчёт емкости при заряде/разряде и расчёт кинетических параметров процесса литирования/делитирования (коэффициента диффузии и энергии активации) передовыми методами GITT и PITT. Методом *in-situ* XRD измерены измерение параметров кристаллической решетки в процессе заряда/разряда, а методом теоретического моделирования (DFT) оценены возможные пути диффузии ионов лития и предложены наиболее вероятные варианты. В целом виден большой объем проделанной работы с логическим ее завершением, отраженным в выводах работы.

Несмотря на попытку оптимизации процесса синтеза автору не удалось синтезировать материал, обладающий значением емкости близким к теоретически расчёtnому, однако результаты моделирования поясняют трудность достижения этого значения. Тем не менее рассчитанные коэффициенты диффузии порядка 10⁻¹³ м²/с (RT) для иона лития в данном материале должны свидетельствовать о быстрой кинетике и возможности полной проработки материала.

Проделанный обширный объем работы, включающий теоретические и практические расчёты, сопоставление их друг с другом и апробация полученных результатов в индексируемых журналах и тематических конференциях свидетельствует о важности исследования. На основании вышеизложенного рекомендую к присуждению степени кандидата химических наук Рыбакову Кириллу Сергеевичу.

Мальчик Федор Игоревич
Заведующий лабораторией
«технологии электрохимических производств», PhD, ассоц. проф.
Кафедры аналитической, колloidной химии и технологии редких элементов
КазНУ им. аль-Фараби
г. Алматы, Казахстан
050040, пр. аль-Фараби 71
Frodo-007@mail.ru
+77072442236

07.06.2024 г

Декан факультета химии
и химической технологии КазНУ им. аль-Фараби
PhD, к.х.н.
Галеева Алина Кулбаевна

