

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Рыбакова Кирилла Сергеевича
«Моделирование функционального поведения полианионных материалов для металл-аккумулирующих систем», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Диссертационная работа Рыбакова Кирилла Сергеевича «Моделирование функционального поведения полианионных материалов для металл-аккумулирующих систем» направлена на разработку модели функционального поведения электродных материалов для металл-ионных аккумуляторов. В рамках работы соискателем:

- отработан синтез материалов на основе ванадата(V) кобальта(II)-лития;
- проведены экспериментальные измерения их функциональных характеристик как катодов для литий-ионных аккумуляторов;
- детально, в том числе с помощью исследований в режиме *operando*, разобран механизм их де/литирования;
- с использованием теоретического моделирования выяснены факторы, ограничивающие энергозапас;
- основываясь на данных теоретических расчетов предложен новый катодный материал для натрий-ионных аккумуляторов – ванадат(V) кобальта(II)-натрия;
- создана веб-платформа для автоматизации проведения квантовохимических расчетов на вычислительном кластере ПРЦ НИТ СГУ им. Н.Г. Чернышевского в пакете VASP;
- разработано программное обеспечение для обработки результатов электрохимических испытаний с помощью потенциостатов-гальваностатов производства ЭЛИНС;
- спроектирован вариант лабораторной электрохимической ячейки для проведения рентгендифракционных исследований электродных материалов в реальном времени (*in situ, operando*).

Примененная автором совокупность физико-химических методов исследования и компьютерного моделирования в рамках данной работы способствовала глубокому пониманию природы электрохимического поведения электродных материалов на основе ванадата(V) кобальта(II)-лития. Выработанные здесь алгоритмы обработки и анализа, очевидно, интересны для применения к другим материалам электродов для металл-ионных аккумуляторов, в т.ч. с целью превентивной оценки их пригодности.

Результаты диссертации опубликованы в рецензируемых научных журналах (в т. ч. высокорейтинговых), апробированы на российских и международных научных конференциях (включая профильные), что подтверждает высокий уровень работы и достоверность представленных данных.

В качестве замечаний по автореферату диссертации Рыбакова К.С. можно указать следующее. 1) Автор приводит совокупный параметр h^2D , но в тексте не дается определение параметру h . 2) Касательно рисунка 9 автору следовало пояснить, что иллюстрация приводится для структуры 1. 3) На рисунке 10 надписи, представленные жёлтым цветом, плохо читаются. Указанные замечания не снижают общей ценности диссертационной работы и полученных в ней результатов.

Диссертация Рыбакова Кирилла Сергеевича «Моделирование функционального поведения полианионных материалов для металл-аккумулирующих систем», является актуальной, оригинальной, научно и практически значимой. Работа удовлетворяет требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Рыбаков Кирилл Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Денис Павлович Опра

кандидат химических наук (специальность 02.00.04 – физическая химия)

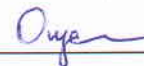
заведующий лабораторией функциональных и электрохимически активных материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химии Дальневосточного отделения Российской академии наук 690022, г. Владивосток, проспект 100-летия Владивостока, 159

E-mail: dp.opra@ich.dvo.ru

Тел.: 8(423)2215284

«11» июня 2024 г.

Денис Павлович Опра



Подпись Дениса Павловича Опра заверяю

Ученый секретарь Института химии ДВО РАН

К.Х.Н.





Дмитрий Владимирович Маринин