

ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа К.С. Рыбакова посвящена совершенствованию металл-ионных аккумуляторов – основных современных энергозапасующих устройств, и её актуальность не вызывает сомнений. Это утверждение подкрепляется также тем фактом, что рассматриваемая диссертационная работа была поддержана грантами РНФ и РФФИ. Диссертация преследовала цель разработать модель функционального поведения электродных материалов для металл-ионных (в первую очередь, литий-ионных) аккумуляторов и получить экспериментальное обоснование этой модели. Судя по автореферату, поставленная цель достигнута. С использованием метода сумм валентных усилий связей, теории функционала плотности, а также машинного обучения автор разработал модель функционального поведения материала положительного электрода, и в частности, теоретически оценил энергию активации диффузии ионов лития. Для экспериментальной проверки модели автор разработал методику получения электродного материала на основе кобальтованадата лития (LiCoVO_4) с использованием твердофазной технологии с предварительной механической активацией исходных веществ. Именно разработка оригинальной методики представляет один из наиболее значимых результатов диссертации К.С. Рыбакова. К сожалению, в автореферате нет указаний на патентную защиту этой методики.

Несомненным достоинством диссертационной работы К.С. Рыбакова является также проведение рентгенофазового анализа активного материала в режиме *operando* при синхронной регистрации зарядных и разрядных кривых.

В качестве замечания по работе можно указать, что интересный и перспективный материал LiCoVO_4 был испытан в составе положительного электрода только в ограниченном диапазоне рабочих потенциалов, что не позволило полностью использовать его теоретическую ёмкость. В то же время понятно, что расширение диапазона рабочих потенциалов в положительную сторону сталкивается с проблемой подбора стабильного электролита.

В целом, насколько можно судить по автореферату, диссертационная работа К.С. Рыбакова выполнена на высоком научном уровне. Объём теоретической и экспериментальной работы вполне соответствует уровню кандидатской диссертации, достоверность и надёжность расчётов и эксперимента не вызывает сомнений. Результаты

работы могут впоследствии быть использованы в различных учебных курсах не только в Саратовском госуниверситете, но и в других вузах. Результаты работы опубликованы в авторитетных изданиях (в том числе, в первоквартильном Journal of Electroanalytical Chemistry) и доложены на представительных конференциях. Таким образом, диссертационная работа К.С. Рыбакова «Моделирование функционального поведения материалов для металл-аккумулирующих систем» отвечает требованиям пп. 9–11, 13, 14 Положения о присуждении учёных степеней, а её автор заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 физическая химия.

Главный научный сотрудник Института физической химии
и электрохимии им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук
доктор химических наук, профессор



/А.М. Скундин/

Заведующая лабораторией процессов в химических источниках тока
Института физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина
Российской академии наук
доктор химических наук



/Т.Л. Кулова/

119071 Москва, Ленинский просп., 31, корп. 4,
Тел.: +7(495)952-14-38
e-mails: askundin@mail.ru, tkulova@mail.ru
14 июня 2024 г.

Подписи А.М. Скундина и Т.Л. Куловой заверяю:

Секретарь Учёного совета Института
физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН

кандидат химических наук



И.И. Варшавская/