

«УТВЕРЖДАЮ»

Председатель Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, доктор химических наук, профессор



В.П. Захаров

2021 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук

Диссертация «Влияние состава и свойств электролитов и электродов на электрохимические характеристики литий-серных аккумуляторов. Экспериментальные исследования и моделирование» выполнена в Уфимском Институте химии – обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (УФИХ УФИЦ РАН), в лаборатории электрохимии.

В период подготовки диссертационной работы соискатель Колосницын Дмитрий Владимирович был прикреплен к лаборатории электрохимии Уфимского Института химии – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (28.10.2015 – 28.10.2018) для выполнения диссертации на соискание ученой степени кандидата наук по научной специальности 02.00.04 – Физическая химия (приказ о зачислении № 106/к от 28.10.2015) без освоения программ подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре. С января 2015 г. по апрель 2017 г. работал в УФИХ УФИЦ РАН в

должности ведущего инженера по информационным технологиям УфИХ УФИЦ РАН, с апреля 2017 г. по январь 2020 г. в должности старшего инженера лаборатории электрохимии УфИХ УФИЦ РАН. С января 2020 г. по июнь 2020 г Дмитрий Владимирович исполнял обязанности научного сотрудника, а с июня 2020 по настоящее время работает научным сотрудником лаборатории электрохимии УфИХ УФИЦ РАН.

В 2001 году Колосницын Дмитрий Владимирович окончил Уфимский Государственный Авиационный Технический Университет (факультет авиационного приборостроения) с присуждением степени бакалавра техники и технологий по направлению «Электроника и микроэлектроника». В 2002 году Колосницын Дмитрий Владимирович окончил Уфимский Государственный Авиационный Технический Университет (специалитет факультета авиационного приборостроения) с присвоением ему квалификация инженера по специальности «Промышленная электроника».

Справка об обучении № 05, содержащая данные об успешной сдаче кандидатских экзаменов по следующим дисциплинам: история и философия науки (химические науки) («отлично», 25 мая 2016 г.), английский язык («отлично», 1 июня 2016 г.), общая химия («хорошо», 19 мая 2017 г.) и по специальности 02.00.04 – Физическая химия («хорошо», 23 мая 2017 г.), выдана 21 ноября 2017 г. Федеральным государственным бюджетным учреждением науки Уфимским Институтом химии Российской академии наук.

Научный руководитель – Кузьмина Елена Владимировна, кандидат химических наук (специальность 02.00.04 – Физическая химия), старший научный сотрудник лаборатории электрохимии Уфимского Института химии – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук.

По итогам обсуждения принято следующее **заключение**:

Оценка выполненной соискателем работы

Диссертационная работа Колосницына Дмитрия Владимировича является цельной, самостоятельной и законченной научно-исследовательской работой, выполненной на высоком профессиональном уровне, и отвечает критериям пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Наиболее существенные научные результаты,

полученные лично соискателем

Соискателем выполнен самостоятельный поиск и анализ современной литературы по теме исследования, что позволило сформулировать цели и задачи диссертационной работы.

С целью повышения эффективности обработки массива экспериментальных данных Колоснициным Дмитрием Владимировичем разработано специализированное программное обеспечение для обработки результатов исследований гальваностатического зарядно-разрядного циклирования электрохимических ячеек («ElChemLab, Data Analyzer», свид. № 2019611773 РФ), а также программное обеспечение для моделирования энергетических и эксплуатационных характеристик литий-серных аккумуляторов («ElChemLab, Battery Designer», свид. № 2019611983 РФ), что позволило расчетными методами исследовать влияние состава электролитов и электродов на энергетику литий-серных аккумуляторов (ЛСА). С помощью разработанных моделей различного типа автором диссертационной работы проведена оценка влияния состава и свойств электролитов на удельные характеристики ЛСА и прогнозирование изменение характеристик ЛСА в процессе гальваностатического циклирования.

Достоверность полученных результатов

Применение современных экспериментальных методов и приборов для электрохимических исследований обеспечивает достоверность и надежность полученных результатов, которые находятся в хорошем соответствии с опубликованными экспериментальными данными и заключениями других

исследователей об особенностях электрохимического восстановления серы в различных электролитных системах.

Научная новизна полученных результатов

Впервые изучено влияние концентрации и природы аниона фоновых солей в электролитах литий-серных аккумуляторов на глубину электрохимического восстановления серы. Установлено, что для обеспечения полного электрохимического восстановления серы количества электролита должно быть достаточным для обеспечения полной сольватации ионов лития, входящих в состав фоновых солей и образующихся полисульфидов лития. Предложена формула для расчёта количества электролита необходимого для обеспечения полного электрохимического восстановления серы при разряде ЛСА.

Обнаружено, что скорость электрохимических превращений серы и продуктов её восстановления (полисульфидов лития) определяется природой аниона фоновых солей и уменьшается с увеличением их основности.

Установлено, что причиной начального снижения емкости ЛСА в процессе циклирования является пассивация лицевой поверхности положительного электрода вследствие перераспределения серы по его объёму из-за подвижности промежуточных продуктов электрохимического восстановления серы и окисления сульфида лития – полисульфидов лития. Глубина проникновения реакций электрохимических превращений серы в объём положительного электрода увеличивается с уменьшением их скорости.

Изучена возможность прогнозирования характеристик литий-серных аккумуляторов с помощью искусственных нейронных сетей различного типа.

Практическая значимость и ценность результатов

Результаты выполненных исследований имеют важное практическое значение для оценки энергетических и эксплуатационных свойств литий-серных аккумуляторов на основе экспериментально определяемых характеристик используемых компонентов. Разработанное программное обеспечение (программы «ElChemLab, Data Analyzer», свид. № 2019611773 РФ, и «ElChemLab, Battery Designer», свид. № 2019611983 РФ) может быть использовано при конструировании

ЛСА с заданными энергетическими и эксплуатационными свойствами. Предложенная методология обработки экспериментальных данных и созданное программное обеспечение позволяет значительно уменьшить трудозатраты, повысить глубину анализа результатов электрохимических исследований и может быть рекомендовано к использованию в исследовательской практике.

Полнота изложения материалов диссертации в опубликованных работах

По теме диссертационной работы опубликовано 8 статей, из них 7 в Российских и зарубежных журналах, рекомендуемых ВАК и индексируемых в Web of Science, тезисах 7 докладов на международных конференциях и тезисах 2 докладов на российских конференциях. Оформлено два свидетельства о регистрации разработанного программного обеспечения.

Список статей:

1. Kuzmina, E.V. Sulfur redistribution between positive and negative electrodes of lithium-sulfur cells during cycling / E.V. Kuzmina, E.V. Karaseva, **D.V. Kolosnitsyn**, L.V. Sheina, N.V. Shakirova, V.S. Kolosnitsyn // J. Power Sources. – 2018. – V. 400. – P. 511-517.
2. Karaseva, E.V. The mechanism of effect of support salt concentration in electrolyte on performance of lithium-sulfur cells / E.V. Karaseva, E.V. Kuzmina, **D.V. Kolosnitsyn**, N.V. Shakirova, L.V. Sheina, V.S. Kolosnitsyn // Electrochimica Acta. – 2019. – V. 296. – P. 1102-1114.
3. Хамитов, Э. М. Теоретическое исследование электрохимического восстановления серы в литий-серных ячейках: Образование октасульфида лития / Э.М. Хамитов, Е.В. Кузьмина, **Д.В. Колосницын**, В.С. Колосницын // Журнал физической химии. – 2019. – Т. 93. – № 6. – С. 895-899.
4. **Колосницын, Д.В.** Моделирование характеристик литий-серных аккумуляторов на основе экспериментальной оценки электрохимических свойств электродных материалов / **Д.В. Колосницын**, Е.В. Кузьмина, Е.В. Карапасева, В.С. Колосницын // Электрохимическая энергетика. – 2019. – Т.19. – №1. – С. 48-59.
5. **Колосницын, Д.В.** Автоматизация обработки данных электрохимических исследований аккумуляторных ячеек / **Д.В. Колосницын**, Е.В. Кузьмина, Е.В. Карапасева // Электрохимическая энергетика. – 2019. – Т. 19. – № 4. – С. 186-197.
6. Kuzmina, E.V. Mitigating strategy in lithium dendrite formation in a Li-S cell in accelerated cycling tests / E.V. Kuzmina, E.V. Karaseva, A.L. Ivanov, **D.V. Kolosnitsyn**,

S.E. Mochalov, R.V. Kumar, V.S. Kolosnitsyn // Electrochimica Acta. – 2019. – V. 327. – P. 135007

7. **Колосницын, Д.В.** Моделирование процессов, вызывающих снижение ёмкости литий-серных аккумуляторов в процессе циклирования / Д.В. Колосницын, Е.В. Кузьмина, Е.В. Карасева, В.С. Колосницын // Известия Уфимского научного центра РАН. – 2020. – №1. – С. 100-105

8. **Колосницын, Д.В.** О возможности моделирования разрядных характеристик литий-серных аккумуляторов с использованием нечётких нейронных сетей / Д.В. Колосницын, Е.В. Кузьмина, Е.В. Карасева, В.С. Колосницын // Электрохимия. – 2021. – Т.57. – № 3. – С. 190-194.

Свидетельства о регистрации программ:

1. Свид. 2019611773 Рос. Федерация. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. «ElChemLab, Data Analyzer» / Д. В. Колосницын; правообладатель УФИЦ РАН (RU). Опубл. 04.02.2019, Реестр программ для ЭВМ. 1 с.

2. Свид. 2019611983 Рос. Федерация. Свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ. «ElChemLab, Battery Designer» / Д. В. Колосницын; правообладатель УФИЦ РАН (RU). Опубл. 07.02.2019, Реестр программ для ЭВМ. 1 с.

Соответствие содержания диссертации паспорту специальности

Диссертационная работа Колосницына Дмитрия Владимировича соответствует паспорту научной специальности 02.00.04 – Физическая химия, а именно пунктам:

4. Теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия; 5. Изучение физико-химических свойств систем при воздействии внешних полей, а также в экстремальных условиях высоких температур и давлений; 6. Неравновесные процессы, потоки массы, энергии и энтропии пространственных и временных структур в неравновесных системах; 10. Связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями осуществления химической реакции.

Диссертация «Влияние состава и свойств электролитов и электродов на электрохимические характеристики литий-серных аккумуляторов. Экспериментальные исследования и моделирование» Колосницына Дмитрий Владимировича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия, отрасль науки – Химические науки.

Заключение принято на заседании объединенного научного семинара Уфимского Института химии – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук.

Присутствовало на заседании 36 человек. Принимало участие в голосовании 36 человек.

Результаты голосования: «за» – 36 чел., «против» – нет, «воздержалось» – нет, протокол №4 от «19» мая 2021 г.

Председатель объединенного научного семинара УфИХ УФИЦ РАН, д.х.н.



Р.Л. Сафиуллин

Секретарь объединенного научного семинара УфИХ УФИЦ РАН, к.х.н.



Е.В. Карасева