Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0821U102371

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 04-10-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Прихожа Юлія Олександрівна

2. Prykhozha Yuliia Oleksandrivna

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор філософії

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 104

Назва наукової спеціальності: Фізика та астрономія

Галузь / галузі знань:

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 29-09-2021

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: Криворізький державний педагогічний університет

Код за ЄДРПОУ: 40787802

Місцезнаходження: проспект Гагаріна, буд. 54, м. Кривий Ріг, Криворізький р-н., Дніпропетровська обл., 50086, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): ДФ 09.053.002

Повне найменування юридичної особи: Криворізький державний педагогічний університет

Код за ЄДРПОУ: 40787802

Місцезнаходження: проспект Гагаріна, буд. 54, м. Кривий Ріг, Криворізький р-н., Дніпропетровська обл., 50086, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Криворізький державний педагогічний університет

Код за ЄДРПОУ: 40787802

Місцезнаходження: проспект Гагаріна, буд. 54, м. Кривий Ріг, Криворізький р-н., Дніпропетровська обл., 50086, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.19

Тема дисертації:

1. Плівки дихалькогенідів перехідних металів для анодів натрій- та літій-іонних батарей

2. Dichacogenide Transient Metal Films for Anodes of Sodium- and Lithium-Ion Batteries

Реферат/анотація:

1. Дисертацію присвячено вивченню плівок дихалькогенідів перехідних металів для анодів натрій- та літій-іонних батарей. Дослідження виконано методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів. Зберігання енергії є найважливішою складовою у розвитку стійких енергетичних ресурсів, інформаційних технологій, електричних транспортних засобів, а також побутової електроніки. Існує багато різних технологій зберігання енергії для різних систем. Літій-іонні батареї – пристрої для перетворення та зберігання електричної енергії – використовуються найчастіше та інтенсивно досліджуються для широкого спектру застосувань. Наділені привабливими властивостями, такими як висока густина енергії, довгий термін експлуатації, невеликий розмір і мала вага, літій-іонні батареї були визнані найбільш ймовірним засобом, який використовуватиметься для зберігання електроенергії в майбутньому. Для задоволення потреб у недорогих матеріалах для зберігання енергії, багато дослідників виявляють

інтерес також до натрій-іонних батарей. Подібність механізмів накопичення енергії між літій- та натрій-іонними батареями дала змогу відносно швидкого їх розвитку. Встановлено особливості перерозподілу заряду на атомах Se плівок TaSe2 з молекулами полімерних електролітів LiClO4 або (та) PEO як матеріалу аноду, що контролюють рух іонів літію та модифікації потенціальних бар'єрів для руху; виявлено, що аноди на основі плівок TaSe2 з молекулами полімерного електроліту PEO, TaSe2 з молекулами полімерних електролітів LiClO4/PEO має найменшу енергозатратність системи при доланні інтеркальованими атомами Li енергетичних бар'єрів у порівнянні із аноду, виконаного на основі плівок TaSe2 без додавання полімерного електроліту. Ключові слова: плівки дихалькогенідів перехідних металів, анод літій-іонних батарей, анод натрій-іонних батарей, атоми Li, атоми Na, електронні властивості, функціонал електронної густини, псевдопотенціал із перших принципів.

2. The dissertation is devoted to the study of dichalcogenide transition metal films for anodes of sodium- and lithium-ion batteries. Methods of density functional theory and pseudopotential from the first principles have been used. Energy storage is a critical component in the development of sustainable energy resources, information technology, electric vehicles, and consumer electronics. There are many different energy storage technologies for different systems. Lithium-ion batteries - devices for converting and storing electricity - are used most often and are intensively studied for a wide range of applications. Endowed with attractive properties such as high energy density, long service life, small size and light weight, lithium-ion batteries have been identified as the most likely means to be used to store electricity in the future. To meet the demand for low-cost energy storage materials, many researchers are also interested in sodium ion batteries. The similarity of energy storage mechanisms between lithium and sodium ion batteries allowed their relatively rapid development. The anode plays a crucial role in batteries because its characteristics directly affect its electrochemical performance. However, anode materials for graphite and silicon lithium-ion batteries are not suitable for the sodium-ion battery system. Graphite provides low system capacity due to the mismatch of the size of the graphite layer of radius to sodium ions. As for silicon, the storage of sodium ions is achieved only in amorphous silicon. A key factor is the development of high-performance electrode materials for sodium ion batteries and the optimization of the architecture of the material of the anodes of lithium-ion batteries. Thus, the problem of studying materials for anodes of sodium and lithium-ion batteries is relevant and is essential to achieve their high performance. Thus, transition metal dichalcogenide films can be used as an anode material for sodium and lithium-ion batteries. The optimal filling of the SnS2 - based film anode material with Na and Li atoms was recorded, which was 75% when the movement of metal atoms was accompanied by the lowest energy costs. It is established that it is more expedient to intercalate Na atoms than Li at the anode on the basis of SnS2 material, because the total energy of the system during intercalation of Na atoms in the SnS2 layer is less than during intercalation of Li atoms. Peculiarities of charge redistribution on Se atoms of TaSe2 films with molecules of polymer electrolytes LiClO4 or (and) PEO as an anode material controlling the motion of lithium ions and modification of potential barriers to motion have been established; found that anodes based on TaSe2 films with molecules of polymer electrolyte PEO, TaSe2 with molecules of polymer electrolytes LiClO4/PEO has the lowest energy consumption of the system when overcoming energy barriers with intercalated Li atoms compared to the anode made of TaSe2 films without adding poly. Keywords: dichalcogenide transition metal films, anode lithium-ion batteries, anode sodium-ion batteries, Li atoms, Na atoms, electronic properties, electron density functional, pseudopotential from the first principles.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Балабай Руслана Михайлівна

2. Balabai Ruslana Mihaylivna

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Моісеєнко Василь Миколайович

2. Moiseienko Vasyl Mykolaiovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.07

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Пелещак Роман Михайлович

2. Peleshchak Roman Mykhailovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.10

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Білинський Ігор Васильович

2. Bilynskyi Igor Vasylovych

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.10

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Возняк Андрій Васильович

2. Voznyak Andriy Vasylovych

Кваліфікація: к. т. н., 05.17.06

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Соловйов Володимир Миколайович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Соловйов Володимир Миколайович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Т.А.