Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0521U101948

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-10-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Потапенко Ганна Валентинівна
2. Potapenko Hanna V

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.04

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 02.00.04

Назва наукової спеціальності: Фізична хімія

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 30-09-2021

Спеціальність за освітою: 7.04010101 хімія

Місце роботи здобувача: Міжвідомче відділення електрохімічної енергетики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 21590307

Місцезнаходження: бульв. Вернадського, 38-А, м. Київ, 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 26.210.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут хімії поверхні ім. О. О. Чуйка Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 03291669

Місцезнаходження: вул. Генерала Наумова, буд. 17, м. Київ, 03164, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

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

Повне найменування юридичної особи: Міжвідомче відділення електрохімічної енергетики НАН України

Код за ЄДРПОУ: 21590307

Місцезнаходження: бульв. Вернадського, 38-А, м. Київ, 03142, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Вплив морфології і стану поверхні на властивості електродних матеріалів для літій-іонних акумуляторів високої потужності

2. Influence of morphology and surface state on the properties of electrode materi-als for high-power lithium-ion batteries

Реферат/анотація:

1. Дисертацію присвячено розвитку наукових засад формування нанорозмірних і поверхнево-модифікованих електродних матеріалів та їхнього застосування у літій-іонних акумуляторах (ЛІА) високої потужності та ємності. У ній вперше розглянуто зв'язок нанорозмірності зі здатністю електродних матеріалів до деградації, вплив наноструктурування на властивості електродних матеріалів і можливість підвищення потужності електродних матеріалів за рахунок модифікування поверхні. Для електродних матеріалів складу LiNiyMnzCo1-y-zO2 з шаруватою структурою знайдено, що переведення Li1.2Ni0.2Mn0.52Co0.08O2 у нанорозмірний стан дозволяє досягти теоретичних значень питомої ємності. Допування Li1.2Ni0.16Co0.08Mn0.54O2 ванадієм підвищує його питому ємність і ефективність циклування.

$LiNi_{0.83}Co_{0.12}Mn_{0.05}O_2$ у формі одиничних, неагломерованих кристалів демонструє кращу здатність до розрядження великими струмами, ніж комерційний аналог. Для нанолистків і мікросфер TiO_2 та ажурних квазісферичних агрегатів $LiMn_2O_4$ у порівнянні з нанокристалічними зразками виявлено, що наноструктурування не є засобом підвищення здатності електродних матеріалів до витримування значних струмових навантажень. Уперше знайдені відміни в електрохімічних властивостях звичайних і нанорозмірних електродних матеріалів в умовах перерозрядження (втиснення надлишку Li^+ у структуру) та визначено шляхи реакцій надлітіювання. Зроблено висновок про вирішальну роль зменшення розміру частинок у взаємодії електродних матеріалів з іонами літію та у зменшенні їхньої стійкості до деградації. Це доводить неприпустимість практичного використання нанорозмірних електродних матеріалів в умовах перерозрядження. Доведено, що регулювання стану поверхні значно підвищує продуктивність електродних матеріалів. Так, покриття $Li_{1.2}Ni_{0.13}Co_{0.13}Mn_{0.54}O_2$ оксидом алюмінію дозволяє збільшити питому ємність матеріалу. Вперше одержано структури $LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O_4$@$LiMn_2O_4$ і PPy@ $LiMn_2O_4$, для яких модифікування поверхні дає змогу досягти надвисоких струмів розрядження (65 С і 300 С, відповідно). Цей підхід відкриває перспективи для створення матеріалів для ЛІА надвисокої потужності, порівнянної з потужністю суперконденсаторів. На прикладі композиту PPy@$LiMn_2O_4$ виявлено внесок псевдоємнісних ефектів у процес інтеркалювання та вперше запропоновано метод оцінки глибини втиснення іонів літію в електродний матеріал. Доведено переваги водорозчинних зв'язуючих над звичайно використовуваним полівініліденфторидом, зокрема, уперше відзначено можливість досягти збільшення не тільки питомої ємності, а й потужності ЛІА при їх використанні завдяки кращій адгезії електродного матеріалу до поверхні колектора струму. Ключові слова: літій-іонні акумулятори, висока потужність, висока ємність, нанорозмірність, наноструктурування, модифікування поверхні.

2. The thesis deals with the development of scientific foundations for the for-mation of nanoscale and surface-modified electrode materials and their use in lithi-um-ion batteries (LIB) of high power and capacity. In it, for the first time, the rela-tionship between nanoscale and the degradability of electrode materials, the effect of nanostructuring on the properties of electrode materials, and the possibility of increasing the power of electrode materials by modifying the surface are considered. For electrode materials of the $LiNiyMnzCo1-y-zO_2$ composition with a layered structure, it is found that the transition of $Li_{1.2}Ni_{0.2}Mn_{0.52}Co_{0.08}O_2$ to the nanoscale state makes it possible to achieve theoretical values of the specific capacity. Doping $Li_{1.2}Ni_{0.16}Co_{0.08}Mn_{0.54}O_2$ with vanadium increases its specific capacity and cycling efficiency. $LiNi_{0.83}Co_{0.12}Mn_{0.05}O_2$ in the form of single, non-agglomerated crystals demonstrates better high current discharge capability than its commercial counter-part. For nanosheets and microspheres of TiO_2 and openwork quasi-spherical ag-gregates of $LiMn_2O_4$, in comparison with nanocrystalline samples, it is found that nanostructuring is not a means of increasing the ability of electrode materials to be exposed to significant current loads. For the first time, differences are noticed in the electrochemical properties of conventional and nanoscale electrode materials under overdischarge conditions (in-troduction of an excess of Li^+ into the structure), and the ways of superlithiation reactions are determined. A conclusion is made about the decisive role of a decrease in the particle size in the interaction of electrode materials with lithium ions and in a decrease in their resistance to degradation. This proves the inadmissibility of the practical use of nanoscale electrode materials under overdischarge conditions. It has been proven that the regulation of the surface state significantly increas-es the productivity of electrode materials. Thus, coating $Li_{1.2}Ni_{0.13}Co_{0.13}Mn_{0.54}O_2$ with aluminum oxide makes it possible to increase the specific capacity of the mate-rial. The $LiNi_{0.5}Mn_{1.5}O_4$@$LiMn_2O_4$ and PPy@$LiMn_2O_4$ structures are obtained for the first time, for which surface modification allows achieving ultrahigh discharge currents (65 C and 300 C, respectively). This approach opens up prospects for the creation of materials for LIBs of ultrahigh power, comparable to the power of su-percapacitors. Using the PPy@$LiMn_2O_4$ composite as an example, the contribution of pseu-docapacitance effects to the intercalation process is discovered and a method is proposed for the first time to estimate the depth of lithium-ion penetration into the electrode material. The advantages of water-soluble binders over the commonly used poly(vinylidene fluoride) have been proved, in particular, the possibility of achiev-ing an increase not only in the specific capacity, but also in the power of LIB when using them, due to the better adhesion of the electrode

material to the surface of the current collector, has been noted for the first time. Key words: lithium-ion batteries, high power, high capacity, nanodimensional-ity, nanostructuring, surface modification.

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. Кириллов Святослав Олександович
2. Kyryllov Svyatoslav O.

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.04

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. Кириллов Святослав Олександович
2. Kyryllov Svyatoslav O.

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.04

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. Андрійко Олександр Опанасович
2. Andriiko Oleksandr Opanasovych

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.05

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. Малєтін Юрій Андрійович
2. Maletin Yuriy A.

Кваліфікація: д. х. н., 02.00.04

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. Білоус Анатолій Григорович

2. Bilous Anatolii Grigorovich

Кваліфікація: д.х.н., 02.00.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Картель Микола Тимофійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Картель Микола Тимофійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.