Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0521U101455

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 28-05-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Куксенко Сергій Петрович
2. Kuksenko Serhii P.

Кваліфікація: к. х. н., 02.00.05

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 01.04.18

Назва наукової спеціальності: Фізика і хімія поверхні

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 13-05-2021

Спеціальність за освітою: 7.04010104

Місце роботи здобувача: 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

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: 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

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 31.15

Тема дисертації:

1. Конверсійні електроди та функціональні електроліти для літієвих джерел струму

2. Conversion electrodes and functional electrolytes for lithium power sources.

Реферат/анотація:

1. Робота присвячена розробці наукових принципів створення високоємних конверсійних електродів I типу і високооборотних конверсійних електродів II типу з великою навантажувальною ємністю та складання новітніх "формул" рідких органічних електролітів, які забезпечують формування механічно міцного й еластичного, хімічно та електрохімічно стабільного, нерозчинного, щільного та тонкого ізолюючого поліфункціонального шару з уніполярною Li+-провідністю й високою адгезією до електрода. Основний підхід полягає в системному керуванні процесами на межі «електрод | електроліт» із врахуванням взаємозв'язків між складовими компонентами і взаємозалежності електрохімічних параметрів електродів. Для протидії великим змінам об'єму конверсійних матеріалів при (де)літіюванні, усунення негативного впливу мікроструктурних перетворень та зведення небажаних побічних реакцій з електролітом до мінімального рівня пропонується модифікування поверхні, їхнє наноструктурування та розміщення у

електрохімічно активній керамічній матриці зі збагаченого вуглецем оксикарбіду кремнію, застосування новітніх полімерних зв'язуючих, уведення добавок до електроліту. Одержано та охарактеризовано оборотний Li-електрод із модифікованою надстехіометричним сплавом Li1+xAl поверхнею, синтезовані ефективні електропровідні керамічні 3D-композити з високим вмістом нанокремнію, що побудовані на ідеї контролю за їх особливостями на атомарному, нано- та макрорівнях, об'єднані у «вуглець–вуглецевому» композиті переваги висококристалічних та високорозупорядкованих вуглеців, застосовані екологічно прийнятні полімерні зв'язуючі на водній основі, які сприяють формуванню міцних зв'язків активних матеріалів зі струмовідводом, запропонована заміна анода із нанесеного на мідну фольгу графіту самою Al-фольгою, що дозволяє не лише підвищити питому енергію літій–іонних акумуляторів, але й істотно здешевити та спростити іхнє виготовлення, розроблені ефективні склади апротонних електролітів для первинних та вторинних літієвих джерел струму. Встановлені межі застосування металевого літію одночасно як електрода порівняння та допоміжного електрода у напівелементах. Показано, що формування дендрітного літію при електроосадженні є процесом неминучим, незважаючи на природу електроліту та щільності струму. Запропо-новані нові критерії, які не залежать від струму осадження–розчинення літію, для адекватного опису експериментальних даних і відображення фізичної природи процесів при його цикліюванні. Виявлена принципова роль силанольних груп на поверхні кремнію та запропоновані механізми процесів за їхньої участі у формуванні пасивуючого шару. Виявлено істотний вплив HF в апротонному електроліті на електрохімічні параметри гібридних електродів з нано-Si. Показана необхідність використання накопиченої необоротної ємності (яка є інтегральним показником необоротного "зв'язування" літію) досліджуваних у напівелементах електродів як ключового критерія оцінки їх практичної придатності. Ключові слова: інтеркаляція, конверсійні механізми, рідкі органічні електроліти, добавки до електроліту, металевий літій, алюмінієва фольга, синтетичні графіти, полімерні зв'язуючі, збагачений вуглецем оксикарбід кремнію, 0D- та 2D-нанокремній, силанольні функціональні групи, керамічні 3D-композити кремнію, ізолюючий поліфункціональний шар, побічні реакції, оборотність електродів, накопичена необоротна ємность, літій–іонні акумулятори, первинні літієві елементи

2. The work is devoted to the development of scientific principles for the creation of high-capacity conversion electrodes of the I type and highly reversible conversion electrodes of the II type with a large loading capacity and the construction of new "formulas" of liquid organic electrolytes (LOE), which provide the formation of mechanically strong and elastic, chemically and electrochemically stable, insoluble, dense and thin solid electrolyte interphase with unipolar Li+-conductivity and high adhesion to the electrode surface. It is shown that the use of trinity is the basis of a systematic approach in the selection of effective materials and optimization of physicochemical processes with their participation, taking into account the relationship of components and interdependence of electrochemical parameters of electrodes, and is the key to creating high energy and powerful lithium power sources (LPS). The principles of management of such processes are formulated and ways of practical use of the executed developments are offered. A reversible Li-electrode with a modified superstoichiometric alloy Li1+xAl surface is obtained and characterized, effective electrically conductive ceramic 3D-composites with high nano-silicon content are synthesized, which are based on the idea of controlling their features at atomic, nano- and macro-levels, combined in a "carbon–carbon" composite advantages of highly crystalline and highly dispersed carbons, environmentally friendly polymeric binders based on water are used, which promote the formation of strong bonds of active materials with current collector, proposed replacement of the anode from graphite deposited on copper foil by Al-foil not only to increase the specific energy of lithium–ion batteries (LIBs), but also to significantly reduce the cost and simplify their manufacture, developed effective compositions of aprotic electrolytes for primary and secondary LPS. The limits of application of lithium metal simultaneously as a reference electrode and an auxiliary electrode in half-cells are established. It is shown that the formation of dendritic lithium during electrodeposition is an inevitable process, despite the nature of the electrolyte and current density. New criteria that do not depend on the plating-stripping current of lithium are proposed to adequately describe the experimental data and reflect the physical nature of the processes during its cycling. The proposed new criteria for cycling the lithium electrode are convenient for rapid analysis of the effects of

impurities in the electrolyte that cause lithium corrosion. The limitation of the use of lithium metal simultaneously as a reference electrode and an auxiliary electrode in half-cells is established. It is proposed to place Al-foil on lithium so that its surface is enriched in situ with a superstoichiometric alloy Li1+xAl. Such an electrode has a low polarization resistance and a homogeneous plating-stripping of lithium is observed on it. For the first time it is proposed to form a free volume of LOE in the cathode space of 1.5 V-cells of the system Li || CuO, which allows: to increase the volume of lithium in the anode and the mass of the cathode (reducing its porosity); avoid increasing the internal resistance of the elements until the end of the discharge; to reduce the time of output voltage of the cells to an acceptable operating level; reduce the swelling of the cells to acceptable limits. For the first time, a new design of 1.5 V-cells of the Li || CuO system was proposed for direct replacement of cells of the Zn || HgO system. A reliable express-method of quantitative assessment of the influence of active materials and binders of electrode layer, as well as electrolyte components on the service life of LIBs has been developed. For this purpose, it is proposed to perform coulometric measurements on laboratory half-cells with high accuracy and to calculate the value of the accumulated irreversible capacity Qairr (n) as a key characteristic parameter. With this approach, there is no need to conduct research using the equipment needed to manufacture commercial LIBs. The "carbon–carbon" composite combines the advantages of highly crystalline and highly disordered carbons, high-performance non-porous ceramic 3D-composites of 0D- and 2D-silicon with carbon-enriched silicon oxycarbide were synthesized for the first time. Key words: intercalation, conversion mechanisms, liquid organic electrolytes, electrolyte additives, metallic lithium, aluminum foil, synthetic graphites, polymer binders, carbon-rich silicon oxycarbide, 0D- and 2D-nanosilicon, silanol functional groups, ceramic 3D silicon composites, solid electrolyte interphase, side reactions, electrode reversibility, accumulated irreversible capacity, lithium–ion batteries, primary lithium cells.

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. Тарасенко Юрій Олександрович
2. Tarasenko Yurii 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. Тарасенко Юрій Олександрович

2. Tarasenko Yurii 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. 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. Пірський Юрій Кузьмич

2. Pirskyy Yuriy K.

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. 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

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.