

Становище

за дисертационен труд на докторант **Христо Георгиев Рашеев** за присъждане на образователната и научна степен “доктор” по Професионално направление 4.2 Химически науки, Докторантска програма “Теоретична химия (Изчислителна химия)” на тема:
„Молекулно моделиране на компоненти за пост-литиевойонни батерии”

Научни ръководители: проф. д-р Аля Таджер
проф. д-р Радостина Стоянова

от проф. д-р Християн Александров Александров,
Факултет по химия и фармация на Софийски Университет

Дисертационният труд на докторант Рашеев е посветен на теоретичното моделиране на процесите на солватация и десолватация в електролити, съдържащи два вида катиони (измежду Li^+ , Na^+ и Mg^{2+}) с цел установяване дали е налице конкуренция или синергизъм между йоните. Тематиката е много актуална, като вече няколко десетилетия литиево-йонните батерии са основен източник на енергия в преносими и мобилни устройства, резервни захранвания, електромобили и др., а ограничените залежи от литий водят до нуждата от нови технологии, в които той да бъде заменен с по-разпространени и евтини алтернативи, каквито са натрий, магнезий, алуминий и др.

Дисертационният труд е написан на 137 страници, съдържа 37 фигури и 39 таблици, цитирани са 188 литературни източника. Структуриран е, както следва: Увод (2 стр.), Цели и задачи (1 стр.), Литературен обзор (20 стр.), Теоретични методи (15 стр.), Резултати и дискусия (86 стр.), Изводи (1 стр.), Приноси (1 стр.) и Библиография (11 стр.). В първите две части е мотивирано теоретичното изследване и ясно и стегнато са формулирани основните цели заложи в десертацията. Литературният обзор е разделен на три части и е базиран на 74 литературни източника. В първата му част са дискутирани електрохимичната стабилност на електролити за метал-йонни батерии, както и теоретични аспекти на взаимодействията йони-разтворител и дифузията на йоните в електролита. Във втората част е обърнато внимание на процесите протичащи на границата електрод-електролит, както и на продуктите

на разпад, които могат да се отложат на електродите. Видовете електродни материали, използвани в съвременните литиево- и пост-литиевойонни батерии са дискутирани в третата глава от литературния обзор, като е обърнато внимание, че в тях ключови са процесите на обратима интеркалация. В глава „Теоретични методи” е представено описание на използваните методи, чрез които са получени резултатите в дисертацията. В началото на глава „Резултати и дискусия” е направена оценка на окислителната и редукционната стабилност на четири разтворителя, използвани експериментално в батерии с възможност за презареждане: етилен карбонат (EC), пропилен карбонат (PC), диметил карбонат (DMC) и диглим (G2). По-нататък са изследвани теоретично процесите на солватация и десолватация в чисти и смесени електролити. За целта са моделирани хомо- (Li^+/Li^+ , Na^+/Na^+ и $\text{Mg}^{2+}/\text{Mg}^{2+}$) и хетеро- (Li^+/Na^+ , $\text{Li}^+/\text{Mg}^{2+}$ и $\text{Na}^+/\text{Mg}^{2+}$) двойки, взаимодействащи с различен брой молекули етилен карбонат. Интересен е резултатът, че двуядрените комплекси Li^+/Na^+ стават предпочитани само в отсъствие на разтворител, докато другите смесени електролити с участието на Mg^{2+} катиони доминират над моноядрените дори и при взаимодействие със значителен брой молекули на разтворителя. Внимателно и детайлно са изследвани и взаимодействията на границата електрод-електролит. Направените изводи в края на дисертационния труд обобщават и отразяват точно получените резултати. Авторефератът отразява пълно и коректно резултатите от проведените теоретични изследвания.

Част от резултатите от дисертационния труд са публикувани в две публикации в списания с импакт фактор от първи квартал (Q1): ChemPhysChem (ИФ(2020) = 3.102) и ACS Omega (ИФ(2020) = 3.512) и са представени на шест (два устни доклада и четири постера) международни и три (три устни доклада) национални конференции. Г-н Рашеев е съавтор на още три публикации в списания от Q1 (The Journal of Physical Chemistry C, Molecules, and Journal of Materials Chemistry A) и е участник в седем научни проекта (три докторантски проекта към ФНИ-СУ и четири национални проекта, два от които с европейско съфинансиране).

Познавам г-н Рашеев като студент в курса ми „Моделиране на периодични системи и наноструктури” в рамките на магистратурата „Изчислителна химия”, присъствал съм и на някои от неговите устни доклади. Впечатленията ми от него като студент и млад учен са отлични.

В заключение смятам, че дисертационния труд на **Христо Георгиев Рашеев** напълно

отговаря по обем и качество и изпълнява всички критерии заложи в Закона за развитие на академичния състав в Република България. Получените резултати и начина на представянето им в дисертационния труд показват, че г-н Рашеев е млад учен с висока научна компетентност и убедено препоръчвам на почитаемото научно жури да му присъди образователната и научна степен „доктор” в Професионално направление 4.2 Химически науки, Докторантска програма “Теоретична химия (Изчислителна химия)”.

01.04.2022 г.

Изготвил становището:

гр. София

/проф. д-р Християн Александров/