

## Становище

върху дисертационен труд на тема „Молекулно моделиране на компоненти за пост-литиевойонни батерии ”

на

**Христо Георгиев Рашеев**

представен за получаване на образователната и научна степен “доктор”  
в Професионално направление 4.2 Химически науки  
Докторантска програма “Теоретична химия (Изчислителна химия)”

от чл. кор. проф. дн Тони Георгиев Спасов  
Факултет по химия и фармация на СУ “Св. Климент Охридски”

Представеният дисертационен труд съдържа 137 страници; включени са 45 фигури и 39 таблици. Библиографията обхваща 188 литературни източника. По обем, структура и оформяне съответства напълно на дисертационна работа за образователна и научна степен “доктор”.

В своята дисертационна работа дисертантът Христо Рашеев си поставя за цел да установи дали при процеси на солватация и десолватация в електролити съдържащи два вида йони е налице конкуренция или синергия между йоните. За постигането на тази цел е създаден подходящ изчислителен протокол за оптимизация на геометрията на обекти с краен и безкраен размер при участие на неутрални и заредени частици. Избрана е също надеждна схема за оценка на термодинамичните величини, характеризиращи електрохимичното поведение на изследваните обекти. Важно е също да се отбележи, че при молекулното моделиране на тези процеси са избрани катиони, аниони, разтворител и електродна повърхност, които са близки до реалните условия на работа на йонни батерии.

Изследванията в дисертационната работа са планирани така, че да се постигне възможно по-пълно термодинамично и електрохимично характеризирание на компонентите на една йонна батерия. Те започват с молекулно моделиране на солватацията и десолватацията в едно- и двукатионни електролити. Чрез анализ на структурата на клъстерите йон-разтворител и на енергетиката на взаимодействието „йон-разтворител“ е определена количествено склонността към образуване на двудрени

комплекси. Поляризиращият ефект на катионите е също оценен. Във втората част на работата е проведено моделиране на взаимодействията (катион-електролит-електрод) на граничната повърхност електрод/електролит. Целта на това изследване е доближаване на получените енергетични характеристики до тези в реалните йонни батерии. Проведен е подходящ избор на електродна повърхност, уточнени са адсорбционните места на повърхността на електрода ( $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$ ). Изследвана е адсорбцията и десолватацията на моноядрени и двуядрени комплекси “Метален йон/и - етилен карбонат“ и влиянието на противойона върху адсорбцията и десолватацията на моно- и двуядрени комплекси.

Получените резултати от много добре планираното и осъществено моделиране на компонентите на йонни батерии са позволили на дисертанта да формулира важни изводи, които са в основата на няколко съществени приноса на изследването. На първо място е предложена стратегия за разширяване на прозореца на електрохимична стабилност на разтворители, използвани в електролити за йонни батерии, базирана на пресмятане на абсолютния електрохимичен потенциал на окисление и редукция. Предложени са оригинални модели за изследване на процесите на солватация и десолватация на алкални и алкалоземни йони в смесени електролити, както и на влиянието на граничната повърхност електрод-електролит върху десолватационните процеси. Обяснени са някои странични реакции на разлагане на компонентите на електролита в следствие на взаимодействието им с електродната повърхност. Установено е, че използването на хибридни електролити съдържащи магнезий с литий или с натрий би могло да бъде успешен подход за преодоляване на някои недостатъци на чистите магнезиеви електролити.

Важен показател за стойността на получените резултати в дисертационния труд са публикациите в международни списания с импакт фактор: *ChemPhysChem* (Q1, Impact Factor: 3.102), *ACS Omega* (Q1, Impact Factor: 3.512). Части от дисертационния труд са представени на 6 международни и 3 национални научни форума.

Докторантът е бил мой студент, показал задълбочени знания в областта на физикохимията на материалите и методите за характеризиране на структурата и свойствата им.

Въз основа на гореизложеното смятам, че представеният дисертационен труд притежава всички необходими качества и дисертантът заслужава присъждането на образователната и научна степен “доктор”.

31.03.2022 г.

проф. дхн Тони Г. Спасов