PhD докторант Джуманова Райгуль Жумахановна “8D07102 -химиялық инженерия” білім беру бағдарламасы бойынша философия ғылымдарының докторы (PhD) дәрежесін алуға ұсынылған “Магний-ионды батареялар үшін титан оксиді негізінде нанокұрылымды анодтық материалды алу” тақырыбындағы диссертациялық жұмысына

ПІКІР БЕРУ

Джуманова Райгуль Жумахановнаның диссертациялық жұмысы магний-иондық батареялар үшін тиімді анодтық материалдарды алу мәселесіне арналған. Қазіргі таңда энергия сақтау құрылғыларына қойылатын талаптар — олардың қауіпсіздігі, экологиялық тазалығы және экономикалық тұрғыдан тиімділігі — жаһандық ғылыми-техникалық дамудың басты бағыттарының біріне айналды. Литий-иондық аккумуляторлар кеңінен қолданылғанымен, олардың бірқатар шектеулері бар:

– литий ресурстарының шектеулілігі мен қымбаттығы,
– қайта өңдеу қиындығы,
– қауіпсіздік мәселелері (дендрит түзілуі және қызып кету қаупі),
– экологиялық жүктеме.

Осы факторлар балама жүйелерді зерттеу қажеттілігін туындатып отыр. Атап айтқанда, магний-иондық батареялар (МИБ) келешегі зор жүйе ретінде қарастырылуда. Бұл жүйелердің артықшылықтары:

– магний иондарының жоғары көлемдік сыйымдылығы (3833 мА·сағ/см^3),
– төмен тотығу потенциалы (–2,37 В),
– дендрит түзбеуі (жоғары қауіпсіздік),
– экологиялық тұрғыдан бейтарап әрі табиғатта кең таралған элемент.

Алайда Mg^{2+} иондарының электрод материалдарына қайтымды түрде интеркаляциялануы күрделі процесс болып табылады. Бұл тиімді анодтық материалдарды таңдау жолындағы негізгі ғылыми кедергілердің бірі.

Осыған байланысты зерттеу жұмысы магний-иондық жүйелерге арналған перспективалы анодтық материал ретінде титан диоксидінің әртүрлі морфологиядағы нанокұрылымды формаларын синтездеуге, олардың электрхимиялық қасиеттерін бағалауға және интеркаляция процестерінің механизмдерін терең түсінуге бағытталған.

Бұл ғылыми бағыттың өзектілігі қазіргі заманғы аккумуляторлық технологиялар саласындағы басты ғылыми міндеттермен тығыз байланысты.

Джуманова Р. диссертациялық жұмысының мақсаты магний-ионды батареялар үшін қолайлы анодтық материал ретінде әртүрлі әдістермен алынған титан диоксиді негізіндегі нанокұрылымды материалдардың құрылымдық және электрхимиялық қасиеттерін зерттеу, олардың тиімділігін бағалау және Mg^{2+} иондарының интеркаляция/деинтеркаляция процестерінің ерекшеліктерін анықтау болып табылады.

Көрсетілген мақсатқа сәйкес алдына келесідей міндеттерді шешу қойылды:

1. Электрхимиялық анодтау, гидротермиялық және қатты фазалық химиялық реакция әдістерінің көмегімен, титан диоксиді (TiO_2) негізіндегі

әртүрлі нанокұрылымды материалды синтездеу және олардың морфологиялық, құрылымдық пен элементтік құрамын заманауи аспаптық әдістермен зерттеу.

2. Синтезделген анодтық материалдардың электрхимиялық қасиеттерін циклдік вольтамперометрия және гальваностатикалық әдістерімен зерттеп, Mg^{2+} иондарының интеркаляция/деинтеркаляция процестерінің кинетикалық параметрлерін анықтау.

3. Mg^{2+} иондарының интеркаляция/деинтеркаляция процестерінің анод материалының құрылымына тәуелділігін анықтап, әртүрлі әдістермен алынған материалдарды Mg-ионды жүйеде қолдану тиімділігін бағалау.

4. COMSOL Multiphysics бағдарламасы арқылы электрхимиялық анодтау әдісімен алынған TiO_2 наотүтіктеріне магний иондарының разрядталуын сандық түрде модельдеу.

Джуманова Райгуль зерттеу барысында бірқатар аспаптық әдістерді электрхимиялық анодтау, гидротермиялық және қатты фазалық химиялық реакция, циклдік вольтамперометрия, импедансты спектроскапия, гальваностатикалық заряд/разряд, рентгендік фазалық талдау, беткі керілу бұрышын анықтау, энергия дисперстік талдау, сканерлеуші электронды микроскопия, циклдік вольтамперометрия және гальваностатикалық заряд/разряд, сонымен заманауи құрал-жабдықтарды ISO-TECH IPS-603 генераторы, ZEISS Gemini SEM, ЭДС, Bruker D5000 –Biolin Scientific оптикалық тензиометрі, MBraun Labstar, Biologic VMP-300 потенциостаты, түтікшелі және муфельді пештер, вакуумды кептіру пеші, ультрадыбыстық ванна, планетарлық диірмен, автоклавт қолданды

Диссертацияда келсі нәтижелерді алды:

1. TiO_2 негізіндегі анод материалдарының морфологиялық және құрылымдық қасиеттері олардың синтез әдістеріне тікелей тәуелді екені анықталды. Электрхимиялық анодтау әдісімен анатаз құрылымды TiO_2 жоғары реттелген нанотүтіктер, гидротермиялық әдіспен микрон деңгейіндегі бөлшектерден диаметрі ондаған нанометрден тұратын наноталшықтар және қатты фазалы химиялық реакция әдісімен TiO_2(B) фазалы бөлшектердің едәуір бөлігі микросфералар түрінде және айқын агрегацияланған нанотаяқшалар алынды.

2. Mg^{2+} иондарының TiO_2 негізіндегі әртүрлі морфологиядағы материалдарға интеркаляция/деинтеркаляция процестері үшін келесі кинетикалық параметрлер анықталды: наноталшықтар үшін диффузиялық коэффициент $D_{Mg^{2+}} = 5{,}70 \times 10^{-11}$ см^2/с және жылдамдық константасы $k^0 = 1{,}67 \times 10^{-11}$ см/с; нанотаяқшалар үшін – $D_{Mg^{2+}} = 2{,}90 \times 10^{-10}$ см^2/с және $k^0 = 1{,}05 \times 10^{-8}$ см/с; ал нанотүтіктер үшін – $D_{Mg^{2+}} = 1{,}51 \times 10^{-10}$ см^2/с және $k^0 = 1{,}67 \times 10^{-10}$ см/с. Барлық зерттелген электродтар (наноталшықтар, нанотаяқшалар және нанотүтіктер) Mg^{2+} иондарының баяу кинетикасына қарамастан, интеркаляция/деинтеркаляция процестеріне қабілетті екенін көрсетті. Сонымен қатар, TiO_2 наноталшықтарында lg(i) мен lg(υ) арасындағы сызықтық тәуелділіктің көлбеу мәні b=0,77–0,83 аралығында өзгеріп, зерттелген жүйеде иондардың диффузиясымен шектелетін интеркаляция

процесі мен беткі псевдосыйымдылықты реакциялардың қатар жүретінін көрсетті. Ал нанотүтіктер мен нанотаяқшалар үшін b-мәндері 0,86–1,08 аралығында болды, бұл олардың электродтық процестерінде псевдосыйымдылық сипатындағы реакциялардың басым екенін айқындайды.

3. Электрхимиялық анодтау арқылы алынған нанотүтіктер жоғары құрылымдық тұрақтылық пен гидрофильдік қасиеттер ие екені анықталып, төмен меншікті сыйымдылық (0,4 мА·сағ/г) көрсетті. Гидротермиялық әдіспен алынған TiO_2 наноталшықтар бастапқыда жоғары сыйымдылық (13,21 мА·сағ/г) көрсетіп, циклдер барысында белсенді аймақтардың деградациясына байланысты сыйымдылығы күрт төмендейтіндігі анықталды. Қатты фазалық әдіспен алынған TiO_2 нанотаяқшалардың алғашқы циклде жоғары меншікті сыйымдылық (~380 мА·сағ/г) көрсетіп, көп циклдік жұмыста олардың кристалл торының тұрақсыздығына байланысты жылдам деградацияға ұшырайтыны белгіленді. Перспективалы анодтық материал ретінде TiO_2 негізіндегі нанотүтіктер жоғары циклдік тұрақтылықпен және оңай жүзеге асатын тиімді электрод дайындау әдісімен ерекшеленуіне байланысты таңдалды.

TiO_2 нанотүтіктеріне магний иондарының разрядталу процесі COMSOL Multiphysics бағдарламасы негізінде алғаш рет модельденді. Жүргізілген модельдеу нәтижелері Mg^{2+} иондарының тасымалы мен электрод бетінің морфологиясы арасында айқын байланыс бар екенін көрсетті. 0,665 $А·м^{-2}$ алмасу ток тығыздығы сияқты тәжірибелік параметрлерді ескере отырып жүргізілген сандық модельдеу реалды процестерге жақын нәтиже беріп, Mg^{2+} иондарына негізделген тұрақты әрі жоғары өнімді микробатареяларды әзірлеуге ғылыми негіз қалыптастырады.

Жалпы алғанда Джуманоа Райгуль өте ауқымды ғылыми-зерттеу жұмысын орындады. Жасалған жұмыстың жаңашылдығы мен теориялық және практикалық маңызы зор.

Орындалған жұмыстардың нәтижелері 13 ғылыми жұмыста көрсетілген, оның ішінде: 2 мақала Clarivate Analytics компаниясының Web of Science ақпараттық базасы мәліметі бойынша импакт факторы нольден кем емес немесе Scopus компаниясының ақпараттық базасына кіретін халықаралық басылымдарда жарияланды, тағы 1 мақала рецензияда; ҚР БҒ министрлігінің БҒ саласындағы бақылау комитеті ұсынған журналдарда екі мақалада; халықаралық ғылыми симпозиумдар мен конференциялардың 8 материалы мен тезистерінің жинақтарында жарияланды.

Джуманова Райгуль Жумахановна әл-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық университетінің химия және химиялық технология факультетінің «Химия» мамандығы бойынша бакалавр, «Бейорганикалық заттартың химиялық технологиясы» мамандығы бойынша магистратураны тәмамдаған. 2019 жылы 8D07102-Химиялық инженерия білім беру бағдарламасы бойынша докторантураға түсті.

Диссертациялық жұмыс әл-Фараби атындағы Қазақ ұлттық университетінің, аналитикалық, коллоидтық химия және сирек элементтер технологиясы кафедрасының ғылыми-зерттеу жоспары бойынша және

«Физика-химиялық зерттеу мен талдаудың әдістері орталығы» жобалары аясында орындалды.

Мемлекеттік гранттық қаржыландыру жобалары:

1) ИРН AP09260383 «Магний-иондық батареялар үшін қайтымды анодты жасау» 2020-2023 жж. (ғылыми қызметкер);

2) ИРН AP22686263 «Магний-ионды батареялардың анодтық материалының диффузиялық қасиеттерін жақсарту» 2024-2026 жж. (жоба жетекшісі) жобалары аясында орындалды.

Сонымен қатар, Франция, Марсель қаласындағы Экс-Марсель университетінің Мадирел зертханасында өткен шетелдік ғылыми-зерттеу тағылымдамасы аясында магний-иондық батареяларға арналған анодтық материалдарды зерттеуге бағытталған бірқатар эксперименттік жұмыстар мен физика-химиялық талдаулар жүргізілді.

Жоғарыда келтірілген мәліметтер негізінде Джуманова Райгуль «Магний-ионды батареялар үшін титан оксиді негізінде нанокұрылымды анодтық материалды алу» тақырыбындағы диссертциялық жұмысы барлық талаптарға сай келеді, ал автордың өзі 8D07102-Химиялық инженерия білім беру бағдарламасы бойынша философия ғылымдарының докторы (Ph.D) деген атаққа лайық деп есептеймін және ғылыми жетекші ретінде қорғауға ұсыныс беруге болады деп есептеймін.

Отандық ғылыми кеңесшісі,
әл-Фараби атындағы Қазақ
Ұлттық университеті, аналитикалық,
коллоидтық химия және сирек
элементтер технологиясы
кафедрасының қауым. проф., PhD Рахымбай Г.С.

РАСТАЙМЫН
әл-Фараби атындағы ҚазҰУ Ғылыми кадрларды
даярлау және аттестаттау басқармасының басшысы
ЗАВЕРЯЮ
Начальник управления подготовки и аттестации
научных кадров КазНУ им. аль-Фараби
«19» 09 2024 ж.қ.