

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Морховой Елизаветы Александровны “КОМБИНИРОВАННЫЕ КРИСТАЛЛОХИМИЧЕСКИЕ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ НОВЫХ СУПЕРИОННЫХ ПРОВОДНИКОВ” представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия

Электродные материалы и твердые электролиты с высокой ионной проводимостью являются основой для создания металл-ионных аккумуляторов следующего поколения. Особенный интерес представляет поиск материалов с проводимостью таких ионов как K^+ , Ag^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Zn^{2+} , Al^{2+} , рассматриваемые научным сообществом как более доступная замена дорогостоящему литию. Очевидно, что полноценный переход к возобновляемой энергетике будет возможен только при условии создания систем хранения энергии в больших масштабах по низкой цене. Наиболее перспективной технологией для таких систем как раз являются металл-ионные аккумуляторы на основе доступных моновалентных или двухвалентных металлов. Именно поиску материалов для таких аккумуляторов посвящена диссертационная работа Е.А. Морховой.

Целью диссертационной работы является разработка методологии компьютерного предсказания материалов с высокой ионной проводимостью и её применение для поиска ионных проводников. В качестве сильных сторон работы следует отметить использование комбинированного подхода включающего три метода анализа ионной проводимости, и как следствие, рассмотрение обширного списка кристаллических структур. Результаты работы имеют существенную практическую значимость, так как некоторые из предсказанных кристаллических структур с высокой ионной проводимостью могут быть использованы для создания перспективных твердых электролитов металл-ионных аккумуляторов.

В качестве замечания следует заметить отсутствие технических деталей по использованному методу ТФП, а также подход к параметризации ГТ метода. Так, в автореферате утверждается, что параметризация заключается в подборе $R_{sd}(\min)$ и $r_{chan}(\min)$, но в тоже время указывается, что это табличные данные. По всей видимости речь идет о подборе R_{sd} и r_{chan} .

В то же время отмеченные выше замечания не затрагивают основные положения работы и ни в коей мере не снижают общей положительной оценки работы. В целом автореферат полностью отражает полученные в работе новые оригинальные результаты, которые хорошо опубликованы и представлялись на всероссийских и международных конференциях.

По актуальности проблемы, объему и научному уровню выполненных исследований, представленная диссертационная работа “Комбинированные кристаллохимические и квантово-химические методы прогнозирования новых суперионных проводников” удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и соответствует специальности 1.4.4 – физическая химия, а её автор Морхова Е.А. заслуживает присвоения ученой степени кандидата химических наук.

Старший преподаватель Сколковского института науки и технологий,

к.ф.-м.н. Аксенов Дмитрий Александрович *Аксенов 03.10.22*

Шифр специальности: 01.04.07, Физика конденсированного состояния

Сколковский институт науки и технологий,

Территория Инновационного Центра “Сколково”, улица Нобеля, д. 3, Москва 121205, Россия

Телефон института: +7 (495) 280 14 81,

Личный телефон: +7 (977) 663 81 41

E-mail: d.aksenov@skoltech.ru, Профиль: <https://faculty.skoltech.ru/people/dmitryaksenov>

Елизавета Морхова
РУКОВОДИТЕЛЬ УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОГО
КАДРОВОГО АДМИНИСТРИРОВАНИЯ
Д.А. Морхова
С.А. Морхова