

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Морховой Елизаветы Александровны «Комбинированные кристаллохимические и квантово-химические методы прогнозирования новых суперионных проводников», представленную к защите на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия

Диссертационная работа Елизаветы Александровны Морховой посвящена **актуальной проблеме** современной физической химии – поиску новых материалов с высокой ионной или смешанной ионно-электронной проводимостью, которые перспективны для использования в полностью твердофазных химических источниках тока как электролитические или электроактивные материалы. Разработанные автором комбинированные кристаллохимические и квантовохимические методы прогнозирования суперионной проводимости оказались эффективным инструментом для такого поиска. В результате выполненных исследований, охвативших соединения с разными типами рабочих ионов. Объектами исследования послужили катионные проводники с однозарядными (Li^+ , K^+ , Ag^+) и многозарядными катионами (Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Zn^{2+} , Al^{3+}) и соединения с кислород-ионной проводимостью. В ходе выполнения диссертационной работы автором было теоретически найдено 736 соединений, которые потенциально могут обладать суперионной проводимостью. **Научная новизна** работы заключается в разработке новых теоретических методов исследования ионных проводников и моделирования диффузии, в обнаружении корреляции между поляризуемостью, электроотрицательностью каркасных ионов и величиной энергетических барьеров для диффузии подвижных ионов; доказано наличие кислород-ионной проводимости в ряде сложнооксидных соединений. **Практическая значимость** работы заключается в том, что ряд изученных соединений могут быть использованы на практике для создания полностью твердофазных химических источников тока. Реферат написан хорошим научным языком, логика изложения понятна; автор провёл большую работу по теоретическому поиску новых электролитов и катодных материалов с помощью квантово-химических расчетов и анализа кристаллического пространства в решетке. Результаты работы опубликованы в авторитетных российских и международных журналах, неоднократно докладывались на профильных научных конференциях. Косвенным свидетельством актуальности исследований является их поддержка грантами Российского научного фонда, Российского фонда фундаментальных исследований и Минобрнауки.

Вместе с тем, при чтении автореферата возникли следующие вопросы и замечания:

1. Рисунки в автореферате слишком маленького размера; это сильно затрудняет понимание текста. Восприятие рисунков затрудняют также подписи с указанием цвета, при этом автореферат черно-белый.
2. Некоторые аббревиатуры в автореферате не расшифрованы, либо расшифровка дана только в конце, что не способствует пониманию текста.
3. Почему в разделе, посвящённом теоретическому поиску новых проводников по одновалентным катионам K^+ и Ag^+ , приведена таблица 5 с данными по перспективным материалам с подвижными двухвалентными катионами? Нарушена логика изложения материала.
4. Вызывает вопросы используемая автором терминология, которая не является общеупотребительной в химии и электрохимии твёрдого тела. Так, широко используется термин «энергия миграции E_m ». Из контекста к концу автореферата можно догадаться, что речь идёт об энергии активации ионной проводимости. То же самое касается «энергии образования вакансий», которую первоначально можно принять за термодинамический потенциал, однако это тоже оказалась энергия активации. Такое вольное обращение с терминами не способствует пониманию смысла диссертационной работы. Если автор считает, что общеупотребительных терминов недостаточно и нужно вести новый, то надо это обосновать в тексте и дать новому термину определение (чего в автореферате нет).

Высказанные замечания не влияют на высокую итоговую оценку работы Е.А. Морховой, которая представляет собой завершённое научное исследование, выполненное на актуальную тему. Все поставленные автором задачи успешно решены, выводы научно обоснованы и соответствуют современным представлениям физической химии.

На основании изложенного считаем, что диссертационная работа на тему «Комбинированные кристаллохимические и квантово-химические методы прогнозирования новых суперионных проводников» по научному уровню, актуальности, научной и практической значимости полученных результатов соответствует требованиям, установленным в отношении кандидатских диссертаций в пп. 9 – 11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 (ред. от 21.04.2016) с учетом изменений, утвержденных постановлением Правительства Российской Федерации № 426 от 20.03.2021, а ее автор, Морхова Е.А., заслуживает присуждения искомой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4 Физическая химия.

Доктор химических наук
(1.4.4 – физическая химия),
зав. лабораторией перспективных
функциональных материалов для
химических источников тока
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Институт химии твёрдого тела
УрО РАН (ИХТТ УрО РАН)

Бушкова Ольга Викторовна

Кандидат физико-математических
наук (01.04.11 – физика магнитных
явлений), научный сотрудник
лаборатории перспективных
функциональных материалов для
химических источников тока
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Институт химии твёрдого тела
УрО РАН (ИХТТ УрО РАН)

Урусова Наталья Вадимовна

<http://www.ihim.uran.ru>

620990, г. Екатеринбург,
ул. Первомайская, 91
ovbushkova@rambler.ru;
bushkova@ihim.uran.ru
тел. 8(343)362-30-36

Подписи О.В. Бушковой и
Н.В. Урусовой заверяю:

Учёный секретарь ИХТТ УрО РАН
кандидат химических наук



Богданова Е.А.

12.10.2022