

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Морховой Елизаветы Александровны**
«Комбинированные кристаллохимические и квантово-химические
методы прогнозирования новых суперионных проводников»,
представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук
по специальности 1.4.4. – Физическая химия

Необходимость развития автономных источников энергии с высокими энергетическими (удельной энергией и мощностью) и эксплуатационными (длительностью эксплуатации, пожаро- и взрывобезопасностью) характеристиками и низкой стоимостью требует разработки новых электродных материалов и электролитов. Применение теоретического анализа для поиска новых материалов позволяет существенно сократить материальные и временные затраты и ускорить процесс создания энергоёмких и дешёвых источников энергии на основе металл-ионных аккумуляторов и твёрдооксидных топливных элементов (ТОТЭ). В связи с этим диссертационная работа Морховой Е.А., посвященная разработке комбинированных кристаллохимических и квантово-химических методов поиска новых кристаллических ионных проводников с катионной и/или анионной проводимостью, с последующим синтезом наиболее перспективных структур, в качестве компонентов металл-ионных аккумуляторов и твёрдотельных топливных элементов, *является актуальной и практически значимой.*

В диссертационной работе Морховой Е.А. впервые был параметризован метод кристаллохимического анализа для моделирования диффузии одно- (K^+ , Ag^+) и мультивалентных (Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Zn^{2+} , Al^{3+}) катионов и анионов O^{2-} . Автором разработан и экспериментально верифицирован комбинированный кристаллохимический и квантово-химический подход к анализу ионной проводимости, заключающийся в последовательном применении геометрико-топологических критериев подвижности ионов, анализа распределения валентных усилий связи в ионной решетке и квантово-химического моделирования барьеров миграции ионов в рамках теории функционала плотности.

В ходе выполнения диссертационной работы Морховой Е.А. теоретически найдено 736 потенциальных новых ионных проводников, проведены расчеты карт миграции и определена размерность их проводимости; для катионных проводников обнаружены корреляции поляризуемость – электроотрицательность каркасных ионов – величина их энергии миграции; доказано наличие анионной проводимости в некоторых структурах типа перовскита ($LaAlO_3$, $LaInO_3$, $La_2InZnO_{5,5}$), колумбита ($Mg_{1-x}M_xNbO_{6-\delta}$ $x=0; 0,1; 0,2$, $M=Li, Cu$) и молибдатах редкоземельных элементов (Ln_2MoO_6 , $Ln=La, Pr, Nd$).

К практической значимости диссертационной работы Морховой Е.А. может быть отнесено активное использование разработанных методов расчета научными группами в зарубежных и Российских научных организациях, внесение в Интернет-сервис <https://batterymaterials.info> информации о 736 спрогнозированных новых потенциальных кристаллических ионных проводников, рекомендации по использованию изученных веществ с Zn-ионной проводимостью (ZnM_2O_4 , $M=Cr, V, Fe$; ZnP_2O_6 , $Zn_3S_2O_9$) для создания полностью твердотельных цинк-ионных аккумуляторов и $MgNb_2O_6$ и Pr_2MoO_6 , в которых доминирует ионный тип проводимости, - в качестве твердых электролитов для ТОТЭ.

К сожалению, хотя в автореферате указано, что *«Завершающим этапом исследований являлся синтез наиболее перспективных кристаллических структур и измерения ионной проводимости и коэффициентов диффузии»*, полученные результаты экспериментальных исследований в тексте автореферата практически не отражены.

Представленные в автореферате диссертации Морховой Е.А. выводы соответствуют поставленным цели и задачам. Полученные Морховой Е.А. результаты прошли апробацию на конференциях различного уровня. Основное содержание диссертационной работы изложено в 26 научных публикациях, в том числе 8 статьях и главы в монографии в рецензируемых изданиях, входящих в перечень ВАК РФ и системы цитирования Scopus и Web of Science, а также тезисах 15 докладов на российских и международных конференциях.

Диссертационная работа Морховой Е.А. выполнена на высоком научном уровне и по своей научной новизне, практической значимости и объему полученных результатов удовлетворяет требованиям пп. 9, 10, 11, 13, 14 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в редакции от 21.04.16) и является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований решена проблема разработки комбинированных кристаллохимических и квантово-химических методов для поиска новых кристаллических ионных проводников с разными типами рабочих ионов, что имеет значение для развития соответствующей отрасли знаний. По актуальности и объему исследования, новизне и достоверности полученных результатов, обоснованности, глубине и значимости выводов диссертационная работа Морховой Елизаветы Александровны удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия. Считаю, что

автор диссертации, Морхова Елизавета Александровна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Доктор химических наук (по специальности 02.00.04 – Физическая химия), профессор (по специальности 02.00.04 – Физическая химия), заведующий Отделом электрохимической энергетики Уфимского Института химии - обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (УФИХ УФИЦ РАН)

Колосницын Владимир Сергеевич
05.10.2022

450054, г. Уфа, пр. Октября, 69;
тел.: +7(347)235 58 00;
моб.: +7 917 34 065 01;
kolos@anrb.ru

Кандидат химических наук (по специальности 02.00.04 – Физическая химия), доцент (по специальности 02.00.04 – Физическая химия), Заведующая лабораторией электрохимии Отдела электрохимической энергетики Уфимского Института химии - обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (УФИХ УФИЦ РАН)

Карасева Елена Владимировна
05.10.2022

450054, г. Уфа, пр. Октября, 69;
тел.: +7(347)235 58 00;
моб.: +7 917 44 393 20;
karaseva@anrb.ru

Подпись Колосницына В.С. и Карасевой Е.В. заверяю:
Ученый секретарь Уфимского Института химии Уфимского федерального исследовательского центра РАН, доктор химических наук



Гималова Ф.А.