

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.

Проблема прогноза новых материалов с необходимой для приложений совокупностью физических и химических свойств – традиционная проблема химических наук и материаловедения. Оригинально, комплексно и глубоко к решению этой проблемы на примере актуальной темы – прогноза новых суперионных материалов – подошла Е.А. Морхова. Ее работа, на мой взгляд, является образцом научного химического исследования, сочетающего в себе серьезную теоретическую проработку проблемы и экспериментальную проверку предсказанных расчетных результатов. Особое впечатление на меня произвела концепция *универсальности* предложенной диссертантом комбинированной схемы теоретического анализа проводимости для разных типов рабочих ионов и для различного состава ионного каркаса. Я считаю, что для абсолютной убедительности этой концепции в будущем необходимо провести прогнозы суперионных проводников с рабочими катионами, характеризующимися асимметрией в распределении электронной плотности. Ведь все полученные диссертантом выводы относятся к катионным проводникам с одно- (Li^+ , K^+ , Ag^+) и мультивалентными (Mg^{2+} , Ca^{2+} , Sr^{2+} , Zn^{2+} , Al^{3+}) катионами, для которых характерно сферическое распределение электронной плотности. Поэтому структуру этих катионов правомерно моделировать шариками, а ионный транспорт представлять как движение точечных зарядов в свободном пространстве кристалла. Будут ли столь впечатляющими результаты прогноза твердотельных проводников, если рабочими катионами станут, например, катионы с неспаренными электронами? Предполагаю, что в этом случае движение катионов по каналам структуры будет затруднено. Это не замечание, а пожелание на будущее – уточнить этот вопрос.

Диссертационный труд Е.А. Морховой производит очень хорошее впечатление: четко обозначены цель и задачи, использованы методы, которые строго ориентированы на достижение цели, логичный и аргументированный текст, высокая научная культура изложения материала и замечательные научные результаты. Все это свидетельствует о сформировавшемся серьезном и талантливом научном работнике. Автореферат написан грамотно и аккуратно оформлен.

Таким образом, можно заключить, что в рецензируемой научной квалификационной работе Е.А. Морховой содержится решение актуальной крупной научной задачи, а именно – создание комбинированного метода прогноза суперионных кристаллов. Предложенное диссертантом решение

указанной задачи имеет, несомненно, важное теоретическое и практическое значение для развития физической химии твердого тела и материаловедения.

Диссертационная работа «Комбинированные кристаллохимические и квантово-химические методы прогнозирования новых суперионных проводников», отвечает требованиям «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. за № 842, а её автор, Елизавета Александровна Морхова заслуживает присуждения ей учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия.

Я, Таланов Валерий Михайлович, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку

Профессор кафедры общей химии и технологии силикатов федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Южно-Российский государственный политехнический университет (НПИ) имени М.И. Платова», доктор химических наук (02.00.04 – физическая химия),

профессор

Таланов Валерий Михайлович

Подпись профессора В.М. Таланова заверяю:

И.о. ученого секретаря

Н.Ю. Курнакова

29.08.2022 г.

(Адрес: 346428 Новочеркасск, Просвещения 132, ЮРГПУ (НПИ), интернет-сайт организации <https://www.npi-tu.ru/> Тел.: (86352)55105,

E-mail: valtanov@mail.ru)

