

ОТЗЫВ

На автореферат диссертации

Эркабаева Александра Мухтаровича

«Локальные структуры в литий-проводящих электролитах на основе низко- и высокомолекулярных нитрилов»,

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия»

Работа посвящена исследованию свойств твердых полимерных электролитов на основе статистического сополимера акрилонитрила и бутадиена $\{[-\text{CH}_2-\text{CH}(\text{C}\equiv\text{N})-]_n[-\text{CH}_2-\text{CH}=\text{CH}-\text{CH}_2-]_m\}$, содержащих соли лития с анионами различной природы. Свойства таких электролитов существенным образом определяются взаимодействием аниона с электронодонорными группами молекул растворителя. В работе была исследована конфигурация и состав частиц, образуемых солями лития LiX ($\text{X} = \text{Br}^-, \text{ClO}_4^-, \text{AsF}_6^-$) при растворении в ацетонитриле и других растворителях. Исследования содержали экспериментальную (инфракрасная спектроскопия) и теоретическую часть – квантовохимические расчеты, проведение которых в данной ситуации – весьма сложная задача, без решения которой невозможна надежная интерпретация экспериментальных результатов. В результате квантовохимических расчетов были предсказаны наиболее устойчивые конфигурации сольватированных молекулами ацетонитрила катионов лития ($\text{Li}^+(\text{CH}_3\text{CN})_n$), анионов ($\text{X}^-(\text{CH}_3\text{CN})_n$) ($\text{X} = (\text{Br}^-, \text{ClO}_4^-, \text{AsF}_6^-)$), ионных пар ($\text{Li}^+ \text{X}^-(\text{CH}_3\text{CN})_n$), ионных квадруполей $[\text{Li}^+ \text{X}^-]_2(\text{CH}_3\text{CN})$, ионных тройников ($\text{Li}^+ \text{X}^- \text{Li}^+$ и $\text{X}^- \text{Li}^+ \text{X}^-$), ассоциатов высокого порядка ($[\text{Li}^+ \text{X}^-]_m$) ($\text{X} = \text{Br}^-, \text{ClO}_4^-, \text{AsF}_6^-$). Эти расчеты в работе выполнены на очень высоком уровне. Были определены оптимальные базисные наборы, что само по себе является трудоемкой задачей. Кроме того, был сделан учет корреляционных поправок в рамках теории возмущений Меллера-Плессе (MP2 и MP4). Показано, что для исследования пространственной структуры и колебательных спектров вполне достаточно использовать метод RHF+MP2 (Хартри-Фока-Рутана с учетом корреляционных поправок MP2) и базисные наборы 6-311G**.

Столь обоснованный выбор метода и оптимизация базисных наборов позволяют доверять результатам расчетов. Результаты отлично согласуются с экспериментальными данными, например, различие для частот колебаний –

менее 6% – является очень хорошим для подобного рода расчетов и дополнительно подтверждает правильность расчета структуры комплексов.

Автор диссертации провел колоссальную работу, безусловно, обладающую новизной. Была решена научная задача установления структур ближнего порядка доминирующих ионных частиц, образованных ионами солей лития и молекулами ацетонитрила и его высокомолекулярного аналога.

Считаю, что диссертация «Локальные структуры в литий-проводящих электролитах на основе низко- и высокомолекулярных нитрилов» полностью соответствует п.9 Положения о присуждении ученых степеней, а её автор – Эркабаев Александр Мухтарович безусловно, заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Доцент по кафедре компьютерной физики

Доцент, кафедра Компьютерной физики,

Институт естественных наук

Уральского федерального университета

им. первого Президента России Б.Н. Ельцина,

кандидат физико-математических наук

по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния,

05.05.2015

Чернышев Владимир Артурович,

620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19

Vladimir.chernyshev@urfu.ru

Подпись В.А. Чернышева заверяю

Документовед
ЮУ

/С.В. Жукова