

## 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»

Хотя большинство современных литиевых и литий-ионных источников тока основано на использовании традиционных жидких электролитов (растворов солей лития в смешанных апротонных растворителях), проблема создания аналогичных источников тока с твёрдыми полимерными электролитами не теряет важности с учётом явных преимуществ полимерных электролитов. Разработка эффективных твёрдых полимерных электролитов с проводимостью по ионам лития во многом сдерживается недостаточностью информации об их строении и транспортных свойствах, которые, в свою очередь, определяются ион-ионными и ион-дипольными взаимодействиями. Диссертационная работа А.М.Эркабаева посвящена исследованию такого межчастичного взаимодействия в растворах солей лития в ацетонитриле и близком по химической природе акрилонитрильно-бутадиеновом сополимере, и это определяет **актуальность** работы. Выбор объектов исследования следует признать вполне удачным – ацетонитрильные растворы солей лития представляют собой хорошие модели практически важных полимерных электролитов на основе акрилонитрила.

Диссертационная работа А.М.Эркабаева выполнена в лаборатории химических источников тока Института высокотемпературной электрохимии УрО РАН – одном из наиболее авторитетных научных центров России в области полимерных электролитов. Творческая атмосфера лаборатории явилась существенным фактором успеха диссертационной работы. Значимость диссертационной работы А.М.Эркабаева подтверждается, в частности, тем обстоятельством, что эта работа была поддержана программой Отделения химии и наук о материалах РАН, программой фундаментальных исследований УрО РАН и грантом Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых.

Наиболее интересные и важные результаты диссертационной работы А.М.Эркабаева можно сформулировать следующим образом.

1. Проведен расчёт полных колебательных спектров всех устойчивых сольватных комплексов ацетонитрила с единичными ионами лития, бромида, перхлората и гексафторарсената, нейтральных двойниковых и квадрупольных комплексов ацетонитрила, а также несольватированных тройниковых ионных ассоциатов. Полученные данные могут войти в справочную литературу, что подчеркивает их ценность.

2. На основе квантово-химических расчетов и ИК-спектроскопического исследования установлено, что упомянутые анионы, сольватирующиеся ацетонитрилом, не сольватируются макромолекулами сополимера акрилонитрила с бутадиеном.

3. Установлено, что способность анионов к сольватации ацетонитрилом уменьшается в ряду  $\text{Br}^- > \text{ClO}_4^- > \text{AsF}_6^-$ .

4. Для ацетонитрильных растворов солей лития предложен оригинальный метод определения числа сольватации отдельных катионов лития и двойников катиона лития с анионом на основании рассчитанных величин сдвига частот колебаний связей  $\text{C}\equiv\text{N}$  и  $\text{C}-\text{C}$ , линейно зависящих от числа сольватации.

Именно эти результаты определяют основную **научную ценность и практическую значимость** диссертационной работы А.М.Эркабаева.

Известно, что образование нейтральных двойниковых и квадрупольных сольватных комплексов существенно отражается на значении эквивалентной электропроводности растворов. К сожалению, из текста автореферата не ясно, проводил ли автор сопоставление концентрационной зависимости эквивалентной электропроводности с

изменением состава сольватных комплексов изученных солей при изменении концентрации.

Основное содержание диссертации А.М.Эркабаева **опубликовано** в авторитетных российских и международных изданиях (в том числе, три статьи в журналах из перечня ВАК) и **доложено** на представительных конференциях.

В целом, насколько можно судить по автореферату, диссертационная работа «Локальные структуры в литий-проводящих электролитах на основе низко- и высокомолекулярных нитрилов» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором теоретических и экспериментальных исследований решена **научная задача** установления состава и конфигурации доминирующих ионных частиц, образованных бромидом, перхлоратом и гексафторарсенатом лития при растворении в ацетонитриле и полимерной матрице близкой химической природы – сополимере акрилонитрила и бутадиена в широком диапазоне концентраций, а также выявление специфики ионной сольватации и ассоциации в макромолекулярном растворителе по сравнению с низкомолекулярным. По актуальности темы, новизне результатов и их практической ценности работа Эркабаева Александра Мухтаровича «Локальные структуры в литий-проводящих электролитах на основе низко- и высокомолекулярных нитрилов» соответствует требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, а её автор заслуживает присуждения ученой степени.

Зав. лабораторией процессов в химических источниках тока  
Института физической химии и электрохимии  
им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук  
доктор химических наук по специальности 02.00.05 - электрохимия

\_\_\_\_\_ (Кулова Татьяна Львовна)

119071 Москва, Ленинский проспект, 31, корп. 4  
+7 91  
tkulova@mail.ru

Главный научный сотрудник  
лаборатории процессов в химических источниках тока  
Института физической химии и электрохимии  
им. А.Н. Фрумкина Российской академии наук  
доктор химических наук по специальности 02.00.05 - электрохимия  
профессор

\_\_\_\_\_ (Скундин Александр Мордухаевич)

119071 Москва, Ленинский проспект, 31, корп. 4  
+7 91  
askundin@mail.ru

Подписи Т.Л.Куловой и А.М. Скундина заверяю:

Ученый секретарь Института  
кандидат химических наук



\_\_\_\_\_

И.Г.Варшавская