

## 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»

Диссертационная работа А.М. Эркабаева посвящена изучению локальной структуры электролитов для первичных литиевых источников тока, литий-ионных аккумуляторов и электрохимических конденсаторов. В качестве таких электролитов выбраны твердые полимерные электролиты (ТПЭ), содержащие электронодонорные группы, в которых растворены литиевые соли. Важнейшие физико-химические и транспортные свойства жидких и полимерных электролитов определяются характером взаимодействий между ионами растворенной соли и молекулами (или макромолекулами) растворителя. Поэтому, исследование локальных структур, формирующихся в электролитах в результате ион-молекулярных взаимодействий, является актуальной научной задачей.

Соискателем проведен большой объем теоретических исследований, направленных на установление локальной структуры систем на основе сополимера акрилонитрила и бутадиена марки СКН-40, содержащих бромид, перхлорат и гексафторарсенат лития. В качестве модельной системы были выбраны растворы солей лития в ацетонитриле. В результате проведенных расчетов были найдены устойчивые конфигурации, энергетические характеристики и ИК-спектры анионных сольватных комплексов, сольватированных ионных пар и ионных квадруполь, образующихся в этих системах. Квантовохимически исследованы ионные ассоциаты высокого порядка для солей лития LiBr и LiClO<sub>4</sub>; предсказаны их устойчивые конфигурации, рассчитаны энергетические характеристики и ИК-спектры. Обнаружен и исследован эффект сольватации многоатомных анионов ClO<sub>4</sub>- и AsF<sub>6</sub>- молекулами ацетонитрила в растворах и определена конфигурация анионных сольватных комплексов. Обнаружено влияние природы и

геометрии аниона на размерность ассоциатов высокого порядка, образованных солями лития, выявлена корреляция между особенностями ионной ассоциации и видом фазовой диаграммы системы СКН-40 – LiX. Установлена конфигурация ионных пар в растворах LiAsF<sub>6</sub> и LiClO<sub>4</sub> в ацетонитриле; впервые обнаружено образование ионных квадруполь в концентрированных растворах LiClO<sub>4</sub>.

Рассчитаны частоты ИК-спектров растворов солей лития в ацетонитриле в длинноволновой области, в частности специфические частоты колебаний ионов лития в первой координационной сфере. Установлены доминирующие ионные частицы в ТПЭ системы СКН-40 – LiClO<sub>4</sub> и проведен сравнительный анализ межчастичных взаимодействий в низко- и высокомолекулярной электролитных системах на основе нитрилов в широком диапазоне концентраций соли лития.

По работе имеется одно замечание:

Соискателем получены прекрасные результаты по моделированию структуры комплексов, образующихся при взаимодействии солей лития и ацетонитрила. При этом остается не ясным, насколько обосновано использование ацетонитрила в качестве модельного объекта для моделирования локальной структуры полимерного электролита? В частности, каким образом в моделях учитывается влияние углеродного каркаса на структуру образующихся комплексов?

Указанное замечание не является существенным и не снижает общего хорошего впечатления от работы. Диссертационная работа А.М. Эркабаева на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований решена научная задача расчета характеристик локальных структур, формирующихся в электролитах в результате ион-молекулярных взаимодействий при растворении соли. Решение данной задачи позволяет получить важную информацию о строении областей ближнего порядка, сольватных комплексов, а также дает

возможность выявить механизмы ионного переноса в электролитах и оптимизировать их целевые свойства.

Считаем, что по актуальности, 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.

Заведующий лабораторией неравновесных твердофазных процессов  
Института химии твердого тела и механохимии СО РАН  
Доктор химических наук (специальность 02.00.21 – Химия твердого тела)  
Старший научный сотрудник

 Уваров Николай Фавстович


630128, Новосибирск  
ул. Кутателадзе, 18  
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН  
Тел. +7-(383)-2332410  
e-mail: [uvarov@solid.nsc.ru](mailto:uvarov@solid.nsc.ru)

Ведущий научный сотрудник  
лаборатории неравновесных твердофазных процессов  
Института химии твердого тела и механохимии СО РАН  
Доктор химических наук (специальность 02.00.21 – Химия твердого тела)  
Старший научный сотрудник

 Пономарева Валентина Георгиевна

630128, Новосибирск  
ул. Кутателадзе, 18  
Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН  
Тел. +7-(383)-2332410  
e-mail: [ponomareva@solid.nsc.ru](mailto:ponomareva@solid.nsc.ru)

«Подписи Н.Ф. Уварова и В.Г. Пономаревой заверяю:»  
ВРИО Ученого секретаря ИХТТМ СО РАН  
Кандидат химических наук

 Матвиенко Александр Анатольевич

  
08.06.2015 г.