

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 Эркабаева А.М. посвящена решению важной и сложной задачи - установлению природы и геометрии локальных структур в новых литий-проводящих полимерных электролитах. Автором работы разработана и реализована оригинальная методика квантово-химических расчетов ИК-спектров частиц и их ассоциатов в литий-проводящих полимерных электролитах на основе низко- и высокомолекулярных нитрилов. На основании результатов трудоемких расчетов по методу Хартри-Фока-Рутана впервые предложены модели локальных структур, формирующихся в твердых электролитах на основе сополимера акрилонитрила и бутадиена СКН-40, содержащих соли лития и многоатомные анионы (бромид, перхлорат и гексафторарсенат). Расчетные ИК-спектры простых и сложных частиц в растворах солей лития в ацетонитриле с хорошей точностью воспроизводят результаты проведенных в работе спектроскопических экспериментов. Диссертационная работа Эркабаева Александра Мухтаровича “Локальные структуры в литий-проводящих электролитах на основе низко- и высокомолекулярных нитрилов” является законченной научно-квалификационной работой. Считаю, что по актуальности, новизне теоретических и экспериментальных результатов и их практической значимости диссертационная работа Эркабаева А.М. 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.

Старший научный сотрудник
ФГБУН Института химии твердого тела УрО РАН,
к.ф.-м.н. (02.00.21-химия твердого тела),

620990, Россия, Екатеринбург,
ул. Первомайская, д.91,
тел.: (343)74-52-19
e-mail: server@ihim.uran.ru

Зайнуллина Вероника Маратовна

Подпись Зайнуллиной В.М. заверяю:

Ученый секретарь ИХТТ УрО РАН, д.х.н.

Т.А. Денисова

07.05.2015

