

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Политова Бориса Вадимовича «Разработка и исследование перспективных материалов на основе молибдатов переходных металлов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.15 – Химия твердого тела

Диссертационное исследование Бориса Вадимовича Политова посвящено установлению корреляции между электронным строением сложных оксидов $Sr_2MMoO_{6-\delta}$ (M – переходный элемент) и их термодинамическими и транспортными характеристиками с целью разработки критериев направленного дизайна изучаемых материалов. Актуальность данной темы обусловлена тем, что рассматриваемые материалы $Sr_2MMoO_{6-\delta}$ могут быть применены в качестве анодов твердооксидных топливных элементов (ТОТЭ), функционирующих в среднетемпературном рабочем интервале. В представляемой на защиту работе автор, исследуя сложные оксиды $Sr_2MMoO_{6-\delta}$, осуществляет моделирование кристаллической, магнитной и электронной структур методами теории функционала электронной плотности, вычисляет параметры образования атомарных дефектов и определяет их влияние на электронную и кристаллическую структуру, проводит экспериментальное определение содержания кислорода и границ термодинамической стабильности, предлагает расчетную модель дефектной структуры, проводит корреляцию дефектной структуры с электропроводностью и производит расчёты энергетических барьеров кислород-ионной миграции. Важными выводами работы являются сформулированные автором принципы дизайна новых перспективных соединений на основе $Sr_2MMoO_{6-\delta}$, которые могут быть использованы при создании электродных материалов для среднетемпературных ТОТЭ.

Научная новизна диссертации Б. В. Политова заключается в том, что впервые методами теории функционала плотности установлены наиболее стабильные модификации кристаллических структур бездефектных оксидов $Sr_2MMoO_{6-\delta}$; впервые проведена корреляция между электронной проводимостью и степенью локализации энергетических состояний 3d-электронов переходного элемента; впервые определены энергетические характеристики образования атомарных дефектов в кристаллической решетке $Sr_2MMoO_{6-\delta}$ в зависимости от катионного состава; впервые предложена математическая модель дефектной структуры $Sr_2MMoO_{6-\delta}$, учитывающая структурные ограничения на размещение кислородных вакансий в решетке и их взаимодействие между собой; впервые проведены систематические вычисления энергетических барьеров кислород-ионной миграции в $Sr_2MMoO_{6-\delta}$.

Объекты и методы исследования, цитируемая литература соответствуют указанной специальности. Диссертационное исследование имеет несомненную практическую значимость: полученная в исследовании информация о корреляции между природой переходного 3d элемента и электронной зонной структурой может быть эффективно применена для дизайна функциональных материалов на основе сложных оксидов $Sr_2MMoO_{6-\delta}$.

Диссертация Б. В. Политова имеет четкую и логичную структуру, состоит из введения, шести глав и заключения. Каждая из первой, второй и третьей глав состоит из одного раздела, четвертая и шестая главы содержат по три раздела, пятая глава состоит из шести разделов. Автореферат полностью отражает содержание диссертационного исследования.

Представленная к защите работа является новаторской, поскольку до настоящего времени не проводилось комплексных исследований, посвященных модельным расчетам кристаллической, магнитной и электронной структур бездефектных оксидов $Sr_2MMoO_{6-\delta}$ методами теории функционала плотности. По материалам работы опубликованы 5 статей в рецензируемых журналах и 6 тезисов докладов на конференциях.

После прочтения автореферата возникли следующие вопросы:

- 1) Таблица 2 содержит экспериментальные данные, включающие параметры элементарной ячейки сложных оксидов $Sr_2MnMoO_{6-\delta}$, $Sr_2CoMoO_{6-\delta}$ и $Sr_2NiMoO_{6-\delta}$. Были ли проведены *ab initio* расчеты параметров? Проводилась ли корреляция между расчетными и экспериментальными данными?
- 2) В пятом разделе пятой главы обсуждаются высокотемпературные электротранспортные свойства оксидов $Sr_2MMoO_{6-\delta}$ ($M = Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni$) в сильно восстановительных условиях. Что понимается в работе под “сильно восстановительными условиями”? Насколько корректно сравнивать термодинамические условия исследований и реальные рабочие условия анода ТОТЭ?

Отмеченные замечания не влияют на общее положительное впечатление от работы. Содержание работы полностью соответствует заявленной специальности. Автореферат диссертации удовлетворяет всем требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (с изменениями на 26 сентября 2022 г.). Автореферат даёт представление, что Б. В. Политов провел актуальное научное исследование и заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.15 – Химия твердого тела.

Отзыв подготовлен доцентом, кандидатом химических наук (специальность 1.4.4 – Физическая химия) Филоновой Еленой Александровной
27.02.2023 г.

Филонова Елена Александровна

Место работы: ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»

Должность: доцент кафедры физической и неорганической химии института естественных наук и математики

Адрес: 620026, г. Екатеринбург, ул. Куйбышева, д. 48

Телефон: +7-908-92-49-619

Эл. почта: elena.filonova@urfu.ru



Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», 620002, Екатеринбург, пр. Мира, 19. Тел. (343)-375-44-44, contact@urfu.ru

Я, Филонова Елена Александровна, даю свое согласие на обработку персональных данных.

Подпись *Филоновой Е.А.*
Заверяю: вед. документовед
С.А. Шумов