

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Никитина Сергея Сергеевича «Равновесие дефектов и перенос заряда в оксидах с двумя электроактивными катионами», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния»

Оксиды со смешанной кислород-ионной и электронной проводимостью широко применяются в высокоэффективных твердооксидных топливных элементах, высокотемпературных электролизерах, мембранных реакторах и газовых сенсорах. Среди смешанных проводников особое внимание привлекают системы на основе феррита стронция. Чистый феррит стронция легко переходит в фазу браунмиллерита, что сопровождается упорядочением кислородных вакансий и резким падением проводимости. Частичное замещение стронция на лантан позволяет стабилизировать фазу перовскита, однако при этом его В связи с этим, поиск заместителей в соединениях на основе феррита стронция, способных улучшить электронный перенос при сохранении высокой ионной проводимости, является актуальной задачей.

В диссертационной работе Никитина С.С. рассмотрены системы на основе феррита стронция, содержащие два электроактивных катиона, что дает дополнительные возможности для направленного регулирования свойств и определяет высокий потенциал их использования для электрохимических устройствах. Однако моделирование равновесия дефектов в подобных системах остаётся сложной задачей. В частности, известные модели точечных дефектов не всегда адекватно описывают дефектную структуру сложных оксидов и механизмы переноса заряда, особенно в случаях. Когда несколько электроактивных катионов, входящих в состав оксида, могут находиться в нескольких зарядовых состояниях. Изучение таких систем представляет огромный интерес как с точки зрения развития подходов к описанию дефектной структуры материалов, так и для совершенствования методов прогнозирования их свойств

В рамках диссертационной работы Никитин С.С. провел большой объем по математическому моделированию квазихимического равновесия ионных и электронных дефектов в нестехиометрических ферритах, допированных катионами металлов. Впервые исследовано влияние парциального давления кислорода и температуры на содержание кислорода и электропроводность для серий сложных оксидов, полученных замещением стронция на неодим, лантан и церий, а также железа на молибден и марганец. Вскрыты специфические особенности влияния молибдена, церия и марганца на свойства ферритов. Впервые предложены аналитические решения для термодинамических моделей дефектной структуры оксидов с двумя электроактивными катионами, что исключает необходимость численного моделирования. Адекватность моделей подтверждена независимыми статистическими термодинамическими расчетами. На основе моделей определены константы равновесия и термодинамические параметры реакций дефектообразования, рассчитаны концентрации носителей заряда и их подвижность в широком диапазоне парциальных давлений кислорода. Полученные результаты важны для целенаправленного поиска новых функциональных материалов для высокотемпературных применений. В частности, расчеты показывают, что твердые растворы, полученные замещением стронция на лантан и церий, обладают очень высокими значениями ионной проводимости могут быть

рекомендованы для использования в твердотельных электрохимических устройствах.

Вопросы и замечания по автореферату:

- Не до конца понятен смысл термина «реконструкция данных», используемого в работе. По-видимому, речь идет о подборе теоретической модели для количественного описания экспериментальных данных. Если это так, то почему не описаны ступенчатые зависимости, явно видимые на рис. 1(б-г), но отсутствующие на рис. 2(б-г)?

- Расчет концентрации ионных и электронных дефектов в исследуемых твердых растворах, содержащих несколько примесных ионов, способных находиться в различных степенях окисления, представляет собой сложную задачу. Заряд кислородных вакансий (кислородная нестехиометрия) может быть скомпенсирован различными комбинациями катионов. В связи с этим не ясно, насколько однозначно определяются все концентрации в рамках модели?

- Не ясно, чем обусловлен практически линейный рост подвижности при увеличении параметра кислородной нестехиометрии в твердых растворах $\text{LaSr}_{0.85-y}\text{Ce}_{0.15}\text{FeO}_{3-\delta}$ (рис. 10).

Указанные замечания не являются существенными и не снижают общего благоприятного впечатления, которое производит работа. Соискателем получены новые интересные результаты, в целом интерпретация экспериментальных данных не вызывает сомнений. По результатам работы опубликовано 9 добротных статей в высокорейтинговых журналах. На основании изложенного считаю, что диссертационная работа «Равновесие дефектов и перенос заряда в оксидах с двумя электроактивными катионами», отвечает всем требованиям пп. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней» (Постановление правительства РФ от 24.09.2013 № 842 в действующей редакции), а ее автор, Никитин Сергей Сергеевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния».

Даю согласие с размещением моих персональных данных в сети Интернета.

Доктор химических наук, доцент,
главный научный сотрудник,
Заведующий лаборатории Ионики твердого тела
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института химии твердого тела и механохимии СО РАН


Уваров Николай Фавстович
10.09.2026 г.

630090, г. Новосибирск, ул. Кутателадзе 18
Тел. +7-383-233-2410;
uvarov@solid.nsc.ru;

Подпись Н. Ф. Уварова заверяю:
Ученый секретарь ИХТТМ СО РАН
Доктор химических наук

14 сентября 2026 г.




Т.П. Шахтшнейдер