

**РЕШЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА УрФУ 02.01.01
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
ДОКТОРА НАУК**

от 19 ноября 2020 г. № 18

о присуждении **Тарасовой Наталии Александровне**, гражданство Российской Федерации, ученой степени доктора химических наук.

Диссертация **«Новые галогензамещенные перовскитоподобные сложные оксиды: структура, ионный (O^{2-} , H^+) транспорт, химическая устойчивость»** по специальности **02.00.21 – Химия твердого тела** принята к защите диссертационным советом УрФУ 02.01.01 11 июня 2020 г. протокол № 6.

Соискатель, **Тарасова Наталия Александровна**, 1986 года рождения, диссертацию на соискание ученой степени кандидата химических наук на тему **«Высокотемпературный протонный транспорт в сложных кислород-дефицитных оксифторидах с перовскитоподобной структурой»** защитила в 2013 г. в диссертационном совете, созданном при Уральском федеральном университете имени первого Президента России Б.Н. Ельцина,

работает в должности доцента кафедры физической и неорганической химии Института естественных наук и математики. ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина».

Диссертация выполнена на кафедре физической и неорганической химии Института естественных наук и математики ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Министерство науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный консультант – доктор химических наук, старший научный сотрудник **Анимица Ирина Евгеньевна**, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина», Институт естественных наук и математики, кафедра физической и неорганической химии, профессор.

Официальные оппоненты:

Дунюшкина Лилия Адиевна, доктор химических наук, ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН (г. Екатеринбург), лаборатория электрохимического материаловедения, ведущий научный сотрудник,

Красненко Татьяна Илларионовна, доктор химических наук, профессор, ФГБУН Институт химии твердого тела УрО РАН (г. Екатеринбург), лаборатория оксидных систем, главный научный сотрудник,

Титова Светлана Геннадьевна, доктор физико–математических наук, ФГБУН Институт металлургии УрО РАН (г. Екатеринбург), лаборатория статики и кинетики процессов, главный научный сотрудник

дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 155 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 75 работ, из них 27 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях и входящих в международные реферативные базы данных и системы цитирования. Общий объем по теме диссертации 14,93 п.л. / 5,76 п.л. – авторский вклад

Статьи, опубликованные в рецензируемых научных журналах и изданиях, определенных ВАК:

1. Tarasova, N. Novel proton-conducting oxyfluorides $Ba_{4-0.5x}In_2Zr_2O_{11-x}F_x$ with perovskite structure / N.Tarasova, I.Animitsa // Solid State Ionics. – 2014. – V.264. – P. 69 – 75. (0.42 п.л./0.21 п.л.) Scopus, WoS
2. Tarasova, N. Protonic transport in oxyfluorides Ba_2InO_3F and $Ba_3In_2O_5F_2$ with Ruddlesden-Popper structure / N. Tarasova, I. Animitsa // Solid State Ionics. – 2015. – V. 275. – P. 53 – 57. (0.28 п.л./0.14 п.л.) Scopus, WoS
3. Tarasova, N. The influence of fluorine doping on short-range structure in brownmillerite $Ba_{1.95}In_2O_{4.9}F_{0.1}$ / N. Tarasova, I.Animitsa, T. Denisova, R. Nevmyvako // Solid State Ionics. – 2015. – V. 275. – P. 47 – 52. (0.35 п.л./0.09 п.л.) Scopus, WoS

4. Tarasova, N. The influence of anionic heterovalent doping on transport properties and chemical stability of F-, Cl-doped brownmillerite $\text{Ba}_2\text{In}_2\text{O}_5$ /N. Tarasova, I. Animitsa // *Journal of Alloys and Compounds*. – 2018. – V. 739. – P. 353 – 359. (0.42 п.л./0.21 п.л.) Scopus, WoS
5. Tarasova, N. Anionic doping (F^- , Cl^-) as the method for improving transport properties of proton-conducting perovskites based on $\text{Ba}_2\text{CaNbO}_{5.5}$ /N. Tarasova, I. Animitsa // *Solid State Ionics*. – 2018. – V. 317. – P. 21 – 25. (0.28 п.л./0.14 п.л.) Scopus, WoS
6. Tarasova, N. The short-range structure and hydration process of fluorine-substituted double perovskites based on barium-calcium niobate $\text{Ba}_2\text{CaNbO}_{5.5}$ /N. Tarasova, I. Animitsa, Ph. Colombari // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. – 2018. – V. 118. – P. 32 – 39. (0.49 п.л./0.16 п.л.) Scopus, WoS
7. Tarasova, N. Fluorine-doped oxygen-ion conductors based on perovskite $\text{Ba}_4\text{In}_2\text{Zr}_2\text{O}_{11}$ / N. Tarasova, I. Animitsa // *Journal of Fluorine Chemistry*. – 2018. – V. 216. – P. 107 – 111. (0.28 п.л./0.14 п.л.) Scopus, WoS
8. Tarasova, N. The influence of fluorine doping on transport properties in the novel proton conductors $\text{Ba}_4\text{In}_2\text{Zr}_2\text{O}_{11-0.5x}\text{F}_x$ with perovskite structure / N. Tarasova, I. Animitsa // *Solid State Sciences*. – 2019. – V.87. – P. 87 – 92. (0.35 п.л./0.17 п.л.) Scopus, WoS
9. Tarasova, N. Fluorine and chlorine doping in oxygen-deficient perovskites: a strategy for improving chemical stability / N. Tarasova, I. Animitsa // *Comptes rendus chimie*. – 2019. – V.22. – P. 363 – 368. (0.35 п.л./0.17 п.л.) Scopus, WoS
10. Tarasova, N.A. Structural Features and Electrical Properties of Chlorine-Substituted Proton Conductors $\text{Ba}_4\text{In}_{2+2x}\text{Zr}_{2-2x}\text{O}_{11-x}$ / N.A. Tarasova, A.O. Galisheva, I.E. Animitsa // *Russian Journal of General Chemistry*. – 2019. – V. 89. – P. 1662 – 1666. (0.40 п.л./0.13 п.л.) Scopus, WoS.

На автореферат поступили 5 положительных отзывов: от директора Института химии твердого тела и механохимии СО РАН, д.х.н., члена-корреспондента РАН **Немудрого Александра Петровича**, г. Новосибирск; от ведущего научного сотрудника лаборатории электрохимических устройств на

твердооксидных протонных электролитах, ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН, д.х.н. **Медведева Дмитрия Андреевича**, г. Екатеринбург; от главного научного сотрудника лаборатории керамического материаловедения Института химии – обособленного подразделения ФГБУН ФИЦ «Коми научный центр УрО РАН», д.х.н., доцента **Пийр Ирины Вадимовны**, г. Сыктывкар; от главного научного сотрудника, ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, д.х.н. **Уварова Николая Фавстовича**, г. Новосибирск, и от ведущего научного сотрудника, ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН, д.х.н. **Пономаревой Валентины Георгиевны**, г. Новосибирск; от ведущего научного сотрудника лаборатории радиационной диффузии, Институт ядерной физики, к. ф.-м. н. **Аксеновой Татьяны Ивановны**, г. Алматы, Казахстан.

Отзывы содержат следующие критические замечания и вопросы: об определении содержания галогенов в исследуемых образцах, в том числе, после гидратации образцов (Немудрый А.П.); о выборе для изучения влияния только фтора и хлора из всего ряда галогенов (Немудрый А.П.); о погрешности измерений электропроводности (Немудрый А.П.); о разнонаправленном изменении симметрии образцов на основе $\text{Ba}_2\text{In}_2\text{O}_5$ в сравнении с образцами на основе $\text{Ba}_4\text{In}_2\text{Zr}_2\text{O}_{11}$ и $\text{Ba}_4\text{Ca}_2\text{Nb}_2\text{O}_{11}$ при гидратации (Медведев Д.А.); о наличии общих факторов, обуславливающих изменение объема элементарной ячейки при допировании фтором и хлором (Медведев Д.А.); о причинах устойчивости галогензамещенных сложных оксидов в атмосферах с повышенным содержанием паров воды (Медведев Д.А.); о виде спектра импеданса и о влиянии на него анионного допирования (Медведев Д.А.); о влиянии парциального давления кислорода на общую электропроводность образцов на основе индата бария (Медведев Д.А.); об определении структуры гидратированных образцов (Пийр И.В.); о виде спектра ЯМР ^{19}F (Уваров Н.Ф., Пономарева В.Г.); о расчете значений подвижности ионов (Уваров Н.Ф., Пономарева В.Г.); об изменении электропроводности BaInO_3F при изменении влажности атмосферы (Уваров Н.Ф., Пономарева В.Г.); о присутствии в тексте

автореферата ряда неудачных выражений (Немудрый А.П., Уваров Н.Ф., Пономарева В.Г., Аксенова Т.И.).

Выбор официальных оппонентов обосновывается компетентностью Дунюшкиной Л.А., Красненко Т.И. и Титовой С.Г. в области химии твердого тела, в частности, изучения структурных особенностей сложнооксидных соединений, физико-химических и электрохимических свойств, что подтверждается их публикациями в высокорейтинговых научных журналах.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени доктора **химических** наук соответствует п.9 Положения о присуждения ученых степеней в УрФУ и является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в области химии твердого тела: сформулированы основные факторы, обеспечивающие возможность получения галогензамещенных сложнооксидных материалов, характеризующихся высокими значениями кислородно-ионной и протонной проводимости и химической устойчивости к углекислому газу.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. **Положения, выносимые на защиту**, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

– Получены новые данные о границах существования и физико-химических свойствах галогензамещенных протонпроводящих твердых растворов $Ba_{2-0.5x}In_2O_{5-x}F_x$, $Ba_2In_2O_{5-0.5y}F_y$, $Ba_{2-0.5x}In_2O_{5-x}Cl_x$, $Ba_2In_2O_{5-0.5y}Cl_y$, $Ba_{4-0.5x}In_2Zr_2O_{11-x}F_x$, $Ba_4In_2Zr_2O_{11-0.5y}F_y$, $Ba_{4-0.5x}In_2Zr_2O_{11-x}Cl_x$, $Ba_4In_2Zr_2O_{11-0.5y}Cl_y$, $Ba_{4-0.5x}Ca_2Nb_2O_{11-x}F_x$, $Ba_4Ca_2Nb_2O_{11-0.5y}F_y$, $Ba_{4-0.5x}Ca_2Nb_2O_{11-x}Cl_x$, $Ba_4Ca_2Nb_2O_{11-0.5y}Cl_y$.

– Установлены основные закономерности изменения структурных характеристик и транспортных свойств сложных оксидов в зависимости от природы и концентрации галогена-допанта, концентрации вакансий кислорода и степени их упорядочения, и условий внешней среды: выявлено, что введение

галогена-допанта приводит к увеличению кислородно-ионной и протонной проводимости независимо от степени упорядочения вакансий кислорода в исходной матрице сложного оксида.

– Получены новые галогензамещенные кислороддефицитные фазы на основе $Ba_2In_2O_5$, $Ba_4In_2Zr_2O_{11}$ и $Ba_4Ca_2Nb_2O_{11}$, характеризующиеся высокой протонной проводимостью и химической устойчивостью к воде и углекислому газу, которые могут быть использованы в качестве материала электролита при разработке твердооксидных топливных элементов.

– Для фаз со блочно-слоевой структурой Раддлесдена-Поппера Ba_2InO_3F , Ba_2InO_3Cl и Ba_2InO_3Br впервые установлена принципиальная возможность реализации протонного переноса.

– Предложен метод допирования анионной подрешетки сложных оксидов, который позволяет увеличить ионную (кислородно-ионную и протонную) проводимость и химическую устойчивость и может быть рекомендован как общий способ оптимизации транспортных характеристик кислородно-ионных и протонных проводников с перовскитоподобной структурой.

На заседании 19 ноября 2020 г. диссертационный совет УрФУ 02.01.01 принял решение присудить Тарасовой Н.А. ученую степень доктора **химических наук**.

При проведении открытого голосования диссертационный совет УрФУ в количестве 16 человек, из них в удаленном интерактивном режиме – 7 человек, из них 6 докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, проголосовали: за – 16, против – нет, воздержались – нет.

Председатель
диссертационного совета УрФУ



Черепанов
Владимир Александрович

Ученый секретарь
диссертационного совета УрФУ
19.11.2020

Кочетова
Надежда Александровна