

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Шеляпиной Марины Германовны**
«СТРУКТУРА, СТАБИЛЬНОСТЬ И ДИНАМИКА МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ГИДРИДОВ
МЕТАЛЛОВ ПО ДАННЫМ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ И ЯДЕРНОГО
МАГНИТНОГО РЕЗОНАНСА»

представленной на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук по специальности
01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа **Шеляпиной Марины Германовны** посвящена комплексному исследованию механизмов, лежащих в основе удержания водорода в системах металл-водород. Исследование проведено на двух классах материалов для хранения водорода: гидридах на основе магния и неупорядоченных гидридах сплавов переходных металлов Ti-V-Cr. Комплексность подхода автора для исследования систем металл-водорода заключается в использовании как квантовомеханических методов с использованием функционала плотности, так и экспериментальных методов ядерного магнитного резонанса. Это позволило автору разработать стратегию поиска новых композитных материалов с высокой запасенной ёмкостью и высокой кинетикой сорбции водорода. Автору удалось выработать основные критерии для отбора наиболее эффективных композиций материалов для хранения водорода и на их основе предложить новый композитный материал, включающий магний с добавками сплава Ti-V-Cr, сочетающий высокую водородоёмкость магния и высокую кинетику сорбции водорода, характерную для сплавов переходных металлов с объёмно-центрированной кубической структурой.

Актуальность данной работы обусловлена назревшей потребностью решения проблемы хранения водорода и развитием перспектив широкого использования водорода в качестве энергоносителя.

Цель работы, которая заключалась в исследовании основных закономерностей, отражающих влияние состава и структурных особенностей ряда гидридов интерметаллических соединений на их характеристики и установление корреляции между исследуемыми свойствами, а также основные задачи, поставленные автором, судя по полученным результатам, полностью выполнены.

К наиболее **важным научным результатам** работы можно отнести следующие:

- комплекс теоретических и экспериментальных исследований распределения водорода и его подвижности в решётке сплава;
- исследование структурные фазовые превращения и модель гидрида разупорядоченного сплава, исследование влияние состава сплава на подвижность водорода в решётке;
- новое объяснение роли переходных металлов в ускорении кинетики сорбции водорода магнием ;
- модель фазовых превращений в магнии, индуцированных вхождением водорода в решётку чистого магния, и в композитных материалах, содержащих магний и добавки переходных металлов;
- новая модель для интерпретации температурных зависимостей времён магнитной релаксации протонов в гидридах металлов, которая может быть применима для широкого класса объектов.

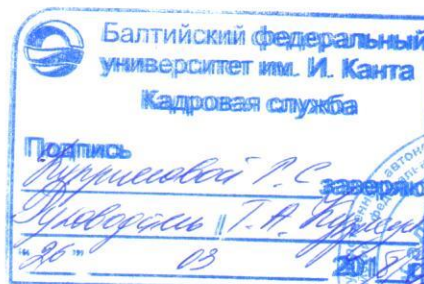
Работа имеет важное **практическое значение** для поиска новых композитных материалов с высокой запасенной ёмкостью и высокой кинетикой сорбции водорода. Важным практическим результатом является предложенный новый композитный материал, включающий магний с добавками сплава Ti-V-Cr, сочетающий высокую водородоёмкость магния и высокую кинетику сорбции водорода, характерную для сплавов переходных металлов с объёмно-центрированной кубической структурой

Автором опубликованы 69 печатные работы, из них в рецензируемых научных журналах, опубликовано 23 статьи, написаны 1 монография в составе коллектива авторов, и по одной главе в 2-х монографиях. Основные результаты работы апробированы на международных и Всероссийских конференциях и симпозиумах. Следует отметить высокую активность автора по обсуждению результатов работы, было сделано 43 сообщения на научных конференциях, в том числе 19 в форме устных докладов, из которых 4 – по приглашению организационного комитета..

Автореферат **Шеляпиной М.Г.** написан в хорошем стиле, материал представлен последовательно и аргументировано. Автореферат диссертации отвечает установленным требованиям, а научные публикации полностью отражают содержание диссертации. Диссертация **Шеляпиной М.Г.** удовлетворяет всем требованиям ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени доктора наук, а её автор, безусловно, заслуживает присуждения учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния.

Профессор института физико-математических наук
и информационных технологий, БФУ им.И.Канта,
доктор физико-математических наук по специальности
01.04.07 –«физика конденсированного состояния».

Куприянова Галина Сергеевна
236011, г.Калининград, ул. А.Невского, 14,
Т. +79217125475
Раб +7(4012)595-595 доб 4527



Handwritten signature in blue ink.

Согласен на включение в аттестационное дело и дальнейшую обработку моих персональных данных, необходимых для процедуры защиты диссертации (Шеляпиной Мариной Германовной) исходя из нормативных документов Правительства, Минобрнауки и ВАК, в том числе на размещение их в сети Интернет на сайте ИМКБ СО РАН, на сайте ВАК, в единой информационной системе.

Куприянова Галина Сергеевна

Гу

