

## 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 учёной степени доктора физико-математических наук.

В последнее десятилетие ведутся интенсивные исследования, направленные на оптимизацию характеристик металлических гидридов. Именно данный класс веществ может сыграть большую роль в разработке эффективного способа использования водорода в качестве энергоносителя. Для понимания механизмов, регулирующих кинетику сорбции водорода металлом, важную роль играют теоретические методы исследования, в первую очередь теория функционала плотности, позволяющая исследовать электронную структуру основного состояния молекулярных систем, фазовые превращения с их участием, а также подвижность легких атомов, в т. ч. водорода, в кристаллической решетке металла. Что касается экспериментальных методов изучения обозначенной выше проблемы, то достаточно часто таковым является ядерный магнитный резонанс (ЯМР) при использовании специальных методов, позволяющих в процессе проведения экспериментов избегать скин-эффекта. Поэтому тема диссертационной работы Шеляпиной М.Г., посвященной исследованию основных закономерностей влияния состава и структуры в ряду гидридов интерметаллических соединений с целью поиска новых перспективных для водородной энергетики композитных материалов представляется вполне актуальной.

В процессе проведения исследований Шеляпина М.Г. получен обширный теоретический и экспериментальный материал, который тщательно проанализирован и обобщен. В результате автором диссертации был получен ряд новых результатов принципиального характера. Так на основании выполненных расчетов различных фаз Mg и  $MgH_x$  предложены схемы структурных превращений, вызванных вхождением водорода в решетку магния в отсутствие или в присутствии переходных металлов с ОЦК структурой. Результат получен конкретно для Nb, но может быть расширен на более широкий класс металлов с ОЦК структурой. Согласно комплексному структурному анализу водород, входя в решетку ОЦК сплавов Ti-V-Cr, полученных из сплавления чистых компонентов, вызывает мартенситное превращение в ГЦК структуру. Водород при входе в решетку Ti-V-Cr занимает тетраэдрические интерстиции. Для моделирования процессов диффузии водорода в решетке неупорядоченных сплавов разработана методика, основанная на применении метода суперячеек. Показано, что понижение стабильности  $MgH_2$  при частичном замещении атомов Mg атомами переходных металлов M происходит за счет ослабления связи между атомами H и Mg. Добавка переходного металла M с ОЦК структурой, не образующего бинарных соединений с магнием, приводит к формированию ОЦК структуры Mg вблизи границы раздела Mg/M.

