

О Т З Ы В

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 по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Шеляпиной М.Г. посвящена исследованию структуры, стабильности и динамики многокомпонентных гидридов металлов, являющихся перспективными материалами хранения водорода. Актуальность проблемы хранения водорода не вызывает сомнения, поскольку это одна из ключевых проблем водородной энергетики. Существуют различные способы хранения водорода, в зависимости от дальнейшего применения водорода предъявляются различные требования к системам его хранения. Интерес к использованию гидридов металлов обусловлен возможностью достижения экстремально высоких объёмных плотностей атомов водорода в решётке металла, а также высокой чистотой извлекаемого водорода. В настоящее время синтезировано большое количество сплавов накопителей водорода, однако ещё не найден материал, который бы удовлетворял всем необходимым требованиям предъявляемым к хранителям водорода, а именно: низкая температура выхода водорода, высокая цикличность, низкая себестоимость. Прогресс в этом направлении возможен только при полном и детальном исследовании структуры, стабильности, механизмов поглощения и выделения водорода.

Данная работа посвящена исследованию состава и структуры гидридов магния и гидридов неупорядоченных сплавов Ti-V-Cr, их стабильности и структурным превращениям, вызванным вхождением водорода в решётку сплава. В качестве основных методов исследования выбран комплементарный подход, включающий в себя сочетание методов теории функционала плотности и ядерного магнитного резонанса. Выбор методов представляется оптимальным, поскольку именно ЯМР спектроскопия позволяет исследовать не только тонкие детали строения материала, но и подвижность водорода, в сочетании с квантовохимическими расчётами появляется возможность создания модели процесса поглощения и выделения водорода для исследуемой системы.

Использование комплементарного подхода позволило автору получить важные данные, объясняющие причины понижения стабильности гидридов магния и улучшения сорбции водорода при добавлении небольшого количества переходных металлов (Ti, V, Nb). Для гидридов сплавов Ti-V-Cr была установлена схема фазовых превращений, происходящих при вхождении водорода в решётку, исследовано распределение водорода в решётке и его подвижность. Добавление 3d элементов (Zr, Ni), На основании этих результатов предложена модель для интерпретации данных протонной магнитной релаксации.

Автореферат написан и оформлен на очень высоком уровне, в соответствии с требованиями ВАК. Надежность полученных результатов не вызывает сомнения.

Работа имеет фундаментальный характер и важна для проблем водородной энергетики. Получение результатов столь высокого уровня требует высокой квалификации как в области эксперимента, так и теории, и позволяет говорить о разработке методологии исследования металлгидридов. Практическая значимость данной работы заключается в предсказательной возможности комплементарного подхода для создания новых композитных материалов для хранения водорода. Полученные экспериментальные и теоретические результаты могут быть востребованы в академических и профильных институтах, занимающихся проблемами водородной энергетики.

Результаты работы опубликованы в международных научных журналах, представлены на российских и международных конференциях. Оценивая работу по содержанию автореферата, можно с уверенностью утверждать, что по объёму выполненного исследования, научной и практической значимости диссертационная работа М.Г.Шеляпиной соответствует квалификационным требованиям ВАК, предъявляемым к докторским диссертациям, а её автор заслуживает присвоения учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Руководитель группы ЯМР спектроскопии в твердом теле
Федерального государственного бюджетного учреждения
науки института катализа им. Г.К. Борескова
Сибирского отделения Российской академии наук
Доктор химических наук, специальность 02.00.15
химическая кинетика и катализ

О.Б. Лапина

Подпись д.х.н. О.Б. Лапиной заверяю
Учёный секретарь ИК СО РАН,
Проф., д.х.н.



Д.В. Козлов

Федеральное государственное бюджетное учреждение
науки институт катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения
Российской академии наук (ИК СО РАН)
630090, Новосибирск, проспект академика Лаврентьева 5
Телефон: 8 (383) 3269 505
e-mail: olga@catalysis.ru

Согласна на включение в аттестационное дело и дальнейшую обработку моих персональных данных, необходимых для процедуры защиты диссертации Шеляпиной Марины Германовны 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.
9 апреля 2018

Лапина О.Б.