

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 по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

В диссертации М. Г. Шеляпиной представлены результаты комплексных теоретических и экспериментальных исследований состава и структурных характеристик гидридов некоторых интерметаллических соединений.

Актуальность данной работы вызвана перспективами использования водорода в качестве энергоносителя, что ставит на повестку дня задачу о безопасных способах хранения этого газа. При этом, по существу, необходимо решить две основные взаимодополняющие проблемы. Первая связана с созданием материала, обеспечивающего поглощение значительного количества газа, а вторая – с возможностью извлечения запасенного газа при небольших энергетических затратах. В диссертационной работе М. Г. Шеляпиной ставились задачи определения структуры и физико-химических свойств гидридов магния, содержащих примесь переходного металла, и сплавов Ti-V-Cr.

В рецензируемой работе применялись как теоретические, так и экспериментальные методы, что позволило получить достоверные данные. В частности, для расчетов параметров структуры гидридов магния и сплавов Ti-V-Cr автор использовал хорошо зарекомендовавший себя современный численный метод на базе теории функционала плотности, а экспериментальная часть работы выполнена с использованием отработанного и надежного метода ядерного магнитного резонанса. В результате проведенных исследований определены причины понижения стабильности гидридов магния при легировании его переходными металлами, выявлена последовательность фазовых превращений при внедрении водорода в решетку сплавов Ti-V-Cr и определена зависимость коэффициента диффузии атомов водорода в решетке данного сплава от ряда факторов. Важным практически значимым результатом работы явилось выработка рекомендаций по составу композитного материала на основе магния с добавками титана, ванадия и хрома, который обладает возможностью растворения большого количества водорода

Материалы, изложенные в диссертации, опубликованы в ведущих российских и зарубежных научных журналах, а также неоднократно докладывались на представительных российских и международных конференциях.

К содержанию автореферата имеются следующие вопросы и замечания:

1. Насколько обосновано использование метода Корринги-Кона-Ростокера в приближении когерентного потенциала для определения характеристик разупорядоченных гидридов? Кроме того, в автореферате не указано, какие программные пакеты использовались для проведения численного моделирования.

2. В автореферате акцент сделан на структурные изменения исследуемых материалов при их насыщении водородом. А каково электронное строение гидридов магния и сплава Ti-V-Cr: металлическое или полупроводниковое? Как электронное строение зависит от концентрации водорода?

Указанные замечания не снижают научную значимость и практическую ценность диссертационной работы М.Г. Шеляпиной. Считаю, что диссертация Марины Германовны Шеляпиной полностью соответствует требованиям, предъявляемым требованиями Высшей аттестационной комиссии, а ее автор заслуживает присвоения искомой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

ведущий научный сотрудник
лаборатории химической физики наноструктур
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Института химической физики им. Н.Н. Семенова
Российской академии наук (ИХФ РАН)
доктор физико-математических наук,
специальность 01.04.17 – химическая физика,
горение и взрыв, физика экстремальных
состояний вещества

Гришин

Гришин Максим Вячеславович

26 марта 2018 года



Собственноручную подпись
сотрудника *Гришина М.В.*
удостоверяю
Секретарь *В.И.*

Почтовый адрес: 119991, Москва, ул. Косыгина, 4

телефон: 8 -495-9397386

e-mail: mvgrishin68@yandex.ru