

## ОТЗЫВ

официального оппонента **Абзаева Юрия Афанасьевича** на диссертацию Люй Цзиньчжэ «Влияние примесных атомов алюминия на процессы накопления и распределения водорода в магнии», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния

**Актуальность темы диссертации.** Разработка научных подходов к твердотельному хранению водорода с низкой рабочей температурой, анализом кинетики гидрирования/дегидрирования с высокой водородоемкостью является актуальной проблемой, как в научном, так и практическом применении. Гидриды магния относятся к перспективным металлическим гидридам для хранения водорода благодаря его высокой гравиметрической и объемной водородоемкости (7,65 масс. % и  $110 \text{ кг H}_2 \cdot \text{м}^{-3}$  соответственно). Высокая гравиметрическая (10,1 масс. %  $\text{H}_2$ ) и объемная ( $149 \text{ кг H}_2 \cdot \text{м}^{-3}$ ) плотность, соответствующая целям 2025 US DOE (the United States Department of Energy), может быть достигнута в алане. Водородосорбционные свойства Mg и Al дополняют друг друга, что предполагает возможность снижения температуры десорбции водорода из матрицы Mg без значительной потери водородоемкости путем легирования атома Al в матрицу Mg.

Диссертационная работа Люй Цзиньчжэ посвящена установлению механизмов влияния алюминия на накопление и распределение водорода в магнии и гидриде магния. Так как установление механизмов влияния алюминия на водородосорбционные свойства магния путем исследования влияния примесных атомов алюминия на структурообразование и характеристику распределения водорода при формировании ОЦТ  $\beta$ -фазы из ГПУ  $\alpha$ -фазы из первых принципов является мало изученным направлением, считаю, что выполненная Люй Цзиньчжэ работа, безусловно, является актуальной.

**Содержание диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованных источников. Работа изложена на 113 страницах машинописного текста, содержит 42 рисунка и 10 таблиц. Список литературы состоит из 196 библиографических наименований.

**Во введении** показана актуальность темы диссертационной работы, связанная с необходимостью снижения температуры десорбции водорода из матрицы Mg без значительной потери водородоемкости путем легирования атома Al в матрицу Mg.

**В первой главе** содержится анализ современного состояния разработок материалов для хранения водорода, в частности, рассмотрены способы улучшения водородсорбционных свойств гидрида магния. Общий объем процитированной литературы составляет 126 наименований, среди которых указано большое количество современных научных статей. Это свидетельствует о достаточной глубине проработки автором обсуждаемого вопроса. Из представленного анализа литературных источников логично вытекают цель и задачи исследования.

**Вторая глава** посвящена представлению метода теоретического расчета и экспериментальных методов для исследования системы Mg-Al-H. Описана процедура осаждения пленок методом магнетронного распыления (физический метод осаждения из паровой фазы). Обсуждаются первопринципные расчеты стабильности структур в рамках теории псевдопотенциалов, реализованные в коде Abinit. Представлены сведения об аналитических методиках, используемых для оценки характеристик полученных материалов.

Следует отметить, что в работе достаточно успешно проведены структурно-фазовые исследования на современных приборах (сканирующая электронная микроскопия с использованием микроскопа Hitachi TM-2800; контактный профилометр Hommel Tester T1000; рентгеноструктурный анализ на дифрактометре Shimadzu XRD 7000S, оснащенный высокоскоростным широкоугольным детектором OneSight).

В этой главе также подробно описаны метод определения содержания водорода в пленках на основе магния и алюминия, метод исследования распределения водорода в пленках. Спектры термодесорбции водорода из пленок на основе магния и алюминия получены на автоматизированном комплексе Gas Reaction Controller с квадрупольным масс-спектрометром RGA100. Наводороживание пленок на основе магния и алюминия проводили на автоматизированном комплексе Gas Reaction Controller.

**Третья глава** посвящена результатам теоретических и экспериментальных исследований влияния Al-примеси на твердый раствор Mg-H.

Представлены результаты распределения водорода по глубине для образцов после гидрирования. Равномерное распределение водорода в магниевой пленке свидетельствует о проникновении атомов водорода в объем пленки, что вместе с градиентом распределения водорода в Mg-10%Al пленке согласуются с приведенными результатами теоретических расчетов. По результатам анализа влияния атома Al на среднее значение энергии связи водорода в твердом растворе Mg-H предложен механизм влияния примесных атомов алюминия на характеристику распределения атомов водорода, растворимых в ГПУ решетке магния.

**В четвертой главе** приведены данные о теоретическом и экспериментальном исследовании влияния примеси Al на свойства системы Mg-H. На основе результатов теоретических расчетов установлен механизм влияния алюминия на накопление и распределение водорода в магнии и гидриде магния.

**В заключении** сформулированы основные выводы по результатам проведенных исследований.

#### **Основные научные результаты и практическая значимость работы.**

При выполнении диссертационной работы Люй Цзиньчжэ получены новые результаты, определяющие **научную новизну и практическую значимость**:

- 1) Впервые определено влияние примесных атомов алюминия на характеристику распределения атомов водорода, растворимых в ГПУ решетке магния.
- 2) Впервые показано влияние примесных атомов алюминия на структурообразование и характеристику распределения водорода при формировании ОЦТ  $\beta$ -фазы из ГПУ  $\alpha$ -фазы.
- 3) Впервые объяснен механизм повышения водородоемкости магния с примесными атомами алюминия по сравнению с чистым магнием.

Результаты, представленные в работе, вносят вклад в развитие физики взаимодействия водорода с металлами и имеют фундаментальный характер. Установлены закономерности влияния алюминия на накопление и распределение водорода в магнии. На практике полученные материалы, благодаря своим характеристикам, могут найти применение в качестве материалов твердотельного хранения водорода.

**Степень обоснованности и достоверности заключений, научных положений, выводов и рекомендаций.** Достоверность результатов исследований, представленных в диссертации, обеспечивается комплексным использованием современных методов исследований, согласованностью результатов, полученных разными методами и в сравнении с результатами, опубликованными в отечественной и зарубежной литературе. Основные результаты работы опубликованы в 9 научных статьях в изданиях, рецензируемых WoS, Scopus (в том числе 6 статей в журналах I квартиля, 2 статьи в журналах II квартиля, 1 статья в журнале III квартиля).

**Соответствие содержания автореферата содержанию диссертации.** Материалы диссертации и автореферата по своему содержанию и представленным результатам соответствуют паспорту научной специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния, в частности пунктам 4-6.

**Соответствие содержания диссертации указанной специальности.** Диссертация по своим целям, задачам, содержанию, методам исследования и научной новизне соответствует

пункту **п. 1** «Экспериментальное изучение физической природы и свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и, в том числе, материалов световодов как в твердом (кристаллы, поликристаллы), так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления», а также **п. 6** «Установление закономерностей влияния технологии получения и обработки материалов на их структуру, механические, химические и физические свойства, а также технологические свойства изделий, предназначенных для использования в различных областях промышленности и медицины» паспорта научной специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки).

#### **Замечания по диссертационной работе**

1. К сожалению, в диссертации цель работы была сформулирована не в обзорной главе, в которой предложен подробный критический анализ результатов литературных данных по проблеме сорбции – десорбции соединений на основе магний – водород, а во введении диссертации.
2. При качественном описании моделей гидрирования на уровне одно- и двухфазных областей, предложенные в начале 4 главы, диссертант в недостаточной степени опирается на результаты моделирования структурных свойств гидридов, приведенных в главах 3 и 4.
3. Рентгеноструктурный фазовый анализ позволяет идентифицировать структурное состояние основных фаз, а также гидридов. К сожалению, диссертантом не было определено количественное содержание и идентификация гидридов на основе Mg-Al-H с полной структурной информацией.

В целом отмеченные замечания не снижают общую положительную оценку работы.

**Заключение.** Диссертационная работа Люй Цзиньчжэ соответствует паспорту специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния в пункте 1: Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и в том числе материалов, как в твердом, так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления. Диссертационная работа соответствует пп. 2.1, 2.2 Порядка присуждения ученых степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете, а её автор Люй Цзиньчжэ заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

С обработкой персональных данных согласен.

#### **Официальный оппонент**

Профессор кафедры «Высшая математика» ФГБОУ ВО ТГАСУ, д.ф.-м.н.

(01.04.07 – Физика конденсированного состояния)

Абзаев Юрий Афанасьевич

13 сентября 2023 г.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Томский Государственный Архитектурно-Строительный Университет», e-mail: abzaev@tsuab.ru, телефон: + 7 (3822) 65-13-51

подпись Абзаева Ю.А. заверяю  
Ученый секретарь ФГБОУ ВО ТГАСУ

Какушкин Ю.А.