

Отзыв

дополнительного члена диссертационного совета ДС.ТПУ.03 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 работы. В настоящее время человечество находится на стадии четвертого энергоперехода, в процессе которого водород должен стать основным энергоносителем вместо углерода. Соответственно, требуется развитие технологий накопления и транспорта водорода, как методик получения, утилизации. Одним из вариантов хранения водорода является формирование его химических соединений. Известен ряд таких соединений, которые характеризуются относительно высокой «емкостью» по водороду. Одним из таких соединений является MgH_2 . Несмотря на высокую водородоемкость, существует несколько основных препятствий на пути практического использования MgH_2 для хранения водорода. С точки зрения термодинамики процессов гидрирования/дегидрирования смесь ионных и ковалентных связей в матрице MgH_2 отвечает за высокую стабильность MgH_2 , и, таким образом, приводит к очень низкому плато давления при комнатной температуре и высокой энтальпии дегидрирования до $75 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1} \text{ H}_2$ намного больше, чем практические требования для металлических гидридов ($20 \div 40 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1} \text{ H}_2$). Высокая гравиметрическая ($10,1 \text{ масс.}\% \text{ H}_2$) и объемная ($149 \text{ кг H}_2 \cdot \text{м}^{-3}$) плотность может быть достигнута в алане. Кроме того, алан может десорбировать водород при низких температурах ($100 \div 200 \text{ }^\circ\text{C}$). Однако высокое давление гидрирования, превышающее 10^5 бар, необходимое для превращения алюминия в алан при комнатной температуре, ограничивает применение алана в качестве обратимого материала для хранения водорода. 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 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 β -фазы из ГПУ α -фазы из первых принципов является мало изученным направлением, выполненная **Люй Цзиньчжэ** работа, является актуальной.

Целью работы является установление закономерностей влияния алюминия в системе Mg-Al-H на процессы накопления и распределения водорода.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, литературного обзора, описания использованных методик исследований, результатов исследований и их обсуждения, выводов, списка литературы. Объем диссертации составляет 113 страниц, включает 42 рисунка, 10 таблиц, 196 библиографических источника.

Содержание диссертации.

Во введении обоснована актуальность работы, сформулированы цель и задачи диссертации, описаны научная новизна и практическая значимость.

В первой главе приведены результаты анализа литературных источников, связанных со способами хранения водорода и методами улучшения водородсорбционных свойств гидрида магния. Общий объем процитированной литературы составляет 170 наименования, среди которых большое количество современных научных статей. Это свидетельствует о достаточно

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. Приведено описание методик анализа структурно-фазового состояния полученных пленок и их водородосорбционных свойств.

Третья глава посвящена результатам теоретических и экспериментальных исследований влияния Al-примеси на твердый раствор Mg-H. установлено влияние Al-примеси на твердый раствор Mg-H. Автором предположен механизм для объяснения разного распределения водорода по глубине в образцах после гидрирования.

Четвертая глава посвящена описанию результатов теоретических и экспериментальных исследований влияния примеси Al на свойства гидридной системы Mg-H. На основе сравнения стабильности разных возможных фаз в процессе гидрирования магния автором предположен механизм повышения водородоемкости магния с примесными атомами алюминия по сравнению с чистым магнием.

В заключении приведены кратко сформулированные основные результаты работы и выводы.

В диссертации сформулированы следующие защищаемые положения

1. В процессе фазового перехода от твердого раствора водорода в магнии в гидрид магния существует промежуточная фаза. Для чистого магния эта промежуточная фаза является ГЦК структурой с кластероподобным распределением водорода, а при наличии в магнии растворенного алюминия в промежуточную фазу входят ГЦК и ОЦК структуры с равномерным распределением водорода.

2. Пленки магния с растворенным алюминием накапливают в более чем в два раза больше водорода, и характеризуется более быстрой скоростью десорбции водорода на порядок по сравнению с пленками гидрида магния без алюминия, что обусловлено стабилизацией алюминием ГЦК и ОЦК структуры магния с равномерным распределением водорода, в которой коэффициенты диффузии водорода существенно выше, чем в ГЦК структуре магния с кластероподобным распределением водорода.

3. Наличие в гидриде магния растворенного алюминия снижает температуру десорбции водорода, что обусловлено снижением энергии связи водорода до ~ 19% в гидриде магния в присутствии алюминия.

В целом защищаемые положения, научная, практическая новизна и значимость работы достаточно хорошо подтверждены проведенными в работе исследованиями.

По работе можно сформулировать некоторые замечания и вопросы:

1) Раз предложенный автором механизм повышения водородоемкости магния с примесными атомами алюминия по сравнению с чистым магнием (рисунок 41) связывается с диффузией водорода, желательно было в диссертационной работе добавить данные, показывающие скорость наводороживания пленки.

2) С какой плотностью потока возможно выделение водорода с рассматриваемого материала и достаточно ли это для практического применения или же для возможного использования требуется буферный накопитель?

Изложенные выше замечания по работе не снижают высокой оценки полученных соискателем результатов и значимости диссертационной работы в целом. Высказанные замечания, надеюсь, будут полезны автору при дальнейшей работе.

Апробация. Основные результаты диссертации опубликованы в 9 работах, из них 9 статей в журналах, входящих в базы данных Scopus и Web of Science (в том числе 6 статей в журналах I квантиля, 2 статьи в журналах II квантиля, 1 статья в журналах III квантиля).

Заключение. Диссертация соответствует паспорту специальности (области исследований) 1.3.8 - Физика конденсированного состояния: 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», п. 2 «Изучение экстремального состояния конденсированных веществ (сильное сжатие, ударные воздействия, изменение гравитационных полей, низкие и высокие температуры)», 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».

Основные положения диссертации достаточно полно изложены в опубликованных соискателем работах и апробированы на научных конференциях. Требования к публикации основных научных результатов диссертации выполнены.

Автореферат отражает содержание диссертации и опубликованных работ.

С учётом сказанного выше считаю, что диссертация «Влияние примесных атомов алюминия на процессы накопления и распределения водорода в магнии» является законченной научно-исследовательской работой, удовлетворяющей требованиям п. 2.1 «Порядка присуждения учёных степеней в Национальном исследовательском Томском политехническом университете» (приказ № 362-1/од от 28 декабря 2021 г), а ее автор, **Люд Циньчжэ**, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Дополнительный член диссертационного
совета ДС.ТПУ.03,
доктор технических наук,
заведующий лабораторией перспективных
материалов энергетической отрасли
ФГАОУ ВО «Национальный
исследовательский Томский политехнический
университет»

Пак Александр Яковлевич

Подпись Пак А.Я. заверяю:
Учёный секретарь ТПУ, к.т.н.

Кулинич Екатерина Александровна

11.09.2023 2023 года.

Полное наименование организации:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

Юридический адрес: 634050, г. Томск, проспект Ленина, 30.

Пак Александр Яковлевич

Должность: профессор отделения электроэнергетики и электротехники ТПУ

Телефон: +7 (3822) 701777 вн.т. 1948

Эл. адрес: ayapak@tpu.ru

Ученая степень, ученое звание: доктор технических наук (1.3.8 – Физика конденсированного состояния)

«Даю свое согласие на обработку персональных данных».