



УТВЕРЖДАЮ
Проректор ТПУ по науке и стратегическим проектам
к.ф.-м.н.
«09» _____ А.С. Гоголев
2024 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

федерального государственного автономного
образовательного учреждения высшего образования
«Национальный исследовательский Томский политехнический университет»

Диссертация «Композиты на основе гидрида магния и углеродных нанотрубок для металлгидридных систем очистки и хранения водорода» по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния выполнена в Отделении экспериментальной физики Инженерной школы ядерных технологий Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

Соискатель Эльман Роман Романович, 1997 года рождения, в 2021 году окончил магистратуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» по специальности 03.04.02 Физика.

Основное место работы соискателя – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», ассистент Отделения экспериментальной физики Инженерной школы ядерных технологий.

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в 2023 г. Федеральным государственным автономным образовательным учреждением высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет».

Тема диссертационной работы утверждена решением ученого совета Инженерной школы ядерных технологий Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет» от «30» ноября 2021 г., номер протокола 9.

Научный руководитель: Кудияров Виктор Николаевич, кандидат технических наук, основное место работы: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет», Отделение экспериментальной физики Инженерной школы ядерных технологий, доцент, назначен приказом по организации № 237-32/с от «25» августа 2021 г.

Диссертация Эльмана Романа Романовича является научно-квалификационной работой, в которой изложены новые обоснованные решения по улучшению характеристик взаимодействия с водородом композитов на основе гидрида магния с добавлением одностенных углеродных нанотрубок, а также улучшения производительности металлгидридной системы за счет применения эффективных теплообменников.

По итогам обсуждения принято следующее заключение.

Актуальность темы и направленность исследования.

В контексте декарбонизации энергетической системы за последние годы наблюдается значительный рост интереса со стороны исследователей, правительства и промышленных предприятий к разработке и использованию новых энергоэффективных и экологически чистых технологий производства, хранения, транспортировки и потребления энергии. В качестве эффективного и экологически чистого энергоносителя

предлагается использовать водород. Гидрид магния является одним из перспективных материалов для аккумулирования водорода благодаря низкой стоимости, распространенности и крайне большой теоретической емкости в 7,65 масс. % водорода. Тем не менее, данный материал обладает некоторым количеством проблем, которые затрудняют его практическое применение, такими как высокая температура выхода водорода и высокие энергия активации сорбции и десорбции водорода. Для решения данной проблемы предлагается измельчать различные каталитические добавки совместно с гидридом магния, и одной из таких добавок являются углеродные нанотрубки. Если рассматривать практическое применение, интерес представляют именно системы для очистки и хранения водорода, эффективность которых связана не только с выбранным материалом-накопителем водорода, но и с организацией системы теплообмена в системе. Часто для этого в систему вводят теплопередающие поверхности. Тем не менее определению механизмов взаимодействия водорода с композитами на основе гидрида магния и углеродных нанотрубок, и подбору параметров теплообменника для металлгидридных систем на основе данного композита уделялось лишь ограниченное внимание.

Личное участие соискателя в получении результатов, изложенных в диссертации.

Постановка целей и задач исследования. Сбор и анализ современного состояния науки и техники по исследованиям применения гидрида магния с каталитическими добавками для хранения водорода, а также использования методов повышения теплопередачи в металлгидридной засыпке. Синтез композита на основе гидрида магния и углеродных нанотрубок. Проведение экспериментов по изучению процессов сорбции и десорбции водорода композитом. Участие в проведении позитронно-аннигиляционных экспериментов на управляемом газовом реакторе. Численное моделирование металлгидридной системы с резистивным нагревателем и теплообменными элементами. Обработка и анализ результатов измерений на основе существующих представлений в области физики конденсированного состояния.

Степень достоверности результатов проведенных исследований.

Достоверность результатов, полученных в работе, подтверждается применением современных методов исследований с достаточной воспроизводимостью измерений, а также обработкой экспериментальных данных, полученных на современном оборудовании. Статистическая обработка полученных результатов проводилась с необходимым количеством повторных измерений с сопоставлением данных с результатами, полученными другими исследователями. Исследования проводились с использованием верифицированных методик с применением откалиброванных установок и средств измерений. Полученные результаты не противоречат имеющимся в научной литературе данным и сформированном представлении о материалах-накопителях водорода на основе гидрида магния и углеродных нанотрубок. Опубликованные в рейтинговых изданиях материалы по теме исследования также свидетельствуют о достаточной апробации, подтверждающей достоверность полученных результатов.

Новизна результатов проведенных исследований.

Научная новизна диссертационной работы заключается в том, что:

1. Впервые произведена оценка фазовых переходов и эволюции дефектной структуры композитной системы на основе гидрида магния и углеродных нанотрубок при помощи методов *in situ* в процессе термостимулированной десорбции.
2. Впервые показано, что для композита на основе гидрида магния и углеродных нанотрубок наблюдается десорбция водорода при температурах, ниже температуры диссоциации гидрида магния.
3. Впервые показано, что внедрение углеродных нанотрубок в структуру гидрида магния приводит к формированию дефектной структуры в области внедрения.

4. Добавление углеродных нанотрубок к гидриду магния приводит не только к улучшению теплообмена, но и к снижению энергии активации процессов сорбции и десорбции водорода.

Практическая значимость результатов проведенных исследований.

Практическая значимость подтверждается выполнением следующих научно-исследовательских работ:

1. Научный проект «Выделение, очистка, компримирование и хранение водорода» в рамках дополнительного соглашения между ТПУ и Министерством науки и высшего образования Российской Федерации № 075-15-2023-375 от 3 апреля 2023 года, Приоритет-2030-НИП/ЭБ-041-375-2023.

2. Грант РНФ "Разработка научно-технических основ проектирования металлгидридных систем хранения водорода с применением методов цифрового моделирования и 3D прототипирования" в рамках соглашения между ТПУ и Российским Научным Фондом № 22-29-01280 от 18 января 2022 и 2023 года, 0.0009.РНФ.2022.

3. Государственное задание «Наука», проект №FSWW-2023-0005 по теме: «Разработка и применение радиоизотопных источников для анализа функционально-градиентных материалов водородной и ядерной энергетики».

4. Государственное задание «Наука», проект №FSWW-2021-0017 по теме: «Лаборатория перспективных материалов и обеспечения безопасности водородных энергосистем».

5. Государственное задание «Наука», проект №FSWW-2020-0017 по теме: «Позитронная спектроскопия изменений дефектной структуры в процессе воздействия водорода на новые функциональные материалы».

6. Научный проект № ВИУ-ОЭФ-177/2020, финансируемый из средств субсидии Программы повышения конкурентноспособности Томского политехнического университета в 2020 году, "Формирование и исследование новых функциональных композитов на основе металл-органических каркасов (MOFs), углеродных наноматериалов и гидридообразующих металлов для разработки эффективных материалов-накопителей водорода".

7. Научный проект № ВИУ-ОЭФ-66/2019, финансируемый из средств субсидии Программы повышения конкурентноспособности Томского политехнического университета в 2019 году, "Разработка научно-технических основ контроля структурно-фазовых изменений и деградации эксплуатационных свойств материалов ядерной и водородной энергетики".

Ценность научных работ соискателя и полнота изложения материалов в опубликованных работах.

Опубликованные работы в полной степени отражают основное содержание диссертационного исследования, пункты научной новизны и практической значимости. Соискателем лично выполнялся анализ и интерпретация результатов исследований, подготовка их к публикации.

Результаты исследований опубликованы в 15 научных трудах, в том числе 13 статей, индексируемых в базах данных «Сеть науки» (Web of Science) и «Скопус» (Scopus), и 2 статьи в журналах, рекомендованных ВАК:

1. Kudiiarov V. N., Kurdyumov N., **Elman R. R.**, Svyatkin L. A., Terenteva D. V., Semyonov O. Microstructure and hydrogen storage properties of MgH₂/MIL-101 (Cr) composite // Journal of Alloys and Compounds. – 2024. – Vol. 976. – Article number 173093. – P. 1–16.

2. Kudiiarov V., Kurdyumov N., **Elman R.**, Laptev R. The phase transitions behavior and defect structure evolution in magnesium hydride/single-walled carbon nanotubes composite at hydrogen sorption-desorption processes. // Journal of Alloys and Compounds. – 2023. – Vol. 953. – Article number 170138. – P. 1–14.

3. Kudiiarov V. N., Kurdyumov N. E., **Elman R. R.**, Pushilina N. S. Structural Features and Phase Transitions during Dehydrogenation of a Composite Based on Magnesium Hydride and

Metal-Organic Framework Structures MIL-101 (Cr) // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2023. – Vol. 17, N. 5. – P. 1156–1161.

4. Kudiyarov V. N., Kurdyumov N., **Elman R. R.**, Laptev R. S., Kruglyakov M. A., Ushakov I. A., Lider A. M. The defect structure evolution in magnesium hydride/metal-organic framework structures MIL-101 (Cr) composite at high temperature hydrogen sorption-desorption processes // Journal of Alloys and Compounds. – 2023. – Vol. 966. – Article number 171534. – P. 1–14.

5. Lyu J., **Elman R.**, Svyatkin L., Kudiyarov V. Theoretical and experimental research of hydrogen storage properties of Mg and Mg-Al hydrides // Journal of alloys and compounds, 2023. – Vol. 938. – Article number 168618. – P. 1–12.

6. Lyu J., **Elman R.**, Svyatkin L., Kudiyarov V. Theoretical and Experimental Studies of Al-Impurity Effect on the Hydrogenation Behavior of Mg // Materials. – 2022. – Vol. 15. – №. 22. – Article number 8126. – P. 1–12.

7. Lyu J., **Elman R. R.**, Svyatkin L. A., Kudiyarov V. N. Theoretical and Experimental Research of Hydrogen Solid Solution in Mg and Mg-Al System // Materials. – 2022. – Vol. 15. – №. 5. – Article number 1667. – P. 1–13.

8. Kudiyarov V., **Elman R.**, Pushilina N., Kurdyumov N. State of the Art in Development of Heat Exchanger Geometry Optimization and Different Storage Bed Designs of a Metal Hydride Reactor // Materials. – 2023. – Vol. 16. – №. 13. – Article number 4891. – P. 1–43.

9. Kudiyarov V. N., Laptev R. S., Bordulev Y. S., **Elman R. R.**, Kurdyumov N. E., Popov A. V., Lider, A. M. Positron Annihilation in a Composite Based on Magnesium Hydride and Carbon Nanotubes during Dehydrogenation // Physical Mesomechanics. – 2022. – Vol. 25, N. 5. – P. 445–452.

10. Kurdyumov N. E., Kudiyarov V. N., Pushilina N. S., **Elman R. R.** Improving the properties of metal-hydrides hydrogen storage systems // AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing, 2023. – Vol. 2899, N. 1. – P. 1–6.

11. Bordulev Y. S., Laptev R. S., Kudiyarov V. N., **Elman R. R.**, Popov A. V., Kabanov D. V., Ushakov I. A., Lider A. M. Positron annihilation spectroscopy complex for structural defect analysis in metal-hydrogen systems // Materials. – 2022 – Vol. 15, N. 5. – Article number 1823. – P. 1–15.

12. Kudiyarov V. N., **Elman R. R.**, Kurdyumov N. The effect of high-energy ball milling conditions on microstructure and hydrogen desorption properties of magnesium hydride and single-walled carbon nanotubes with iron nanoparticles // Metals. – 2021 – Vol. 11, N. 9. – Article number 1409. – P. 1–14.

13. Shupen S., Larionov V. V., Kudiyarov V. N., **Elman R. R.**, Lider A. M. Characterization of the Hydrogen Migration in a VT1-0 Titanium Alloy by Thermo-EMF and Eddy Current Nondestructive Control Methods // Russian Metallurgy (Metally). – 2020. – Vol. 2020. – P. 1276–1282.

14. Кудияров В. Н., Лаптев Р. С., Бордулев Ю. С., **Эльман Р. Р.**, Курдюмов, Н. Е., Попов А. В., Лидер А. М. Особенности аннигиляции позитронов в процессе дегидрирования композита на основе гидрида магния и углеродных нанотрубок // Физическая мезомеханика. – 2022. – Т. 25, N. 3. – С. 75–83.

15. Сюй Ш., Ларионов В. В., Кудияров В. Н., **Эльман Р. Р.**, Лидер А. М. Характеристика миграции водорода в титановом сплаве VT1-0: с помощью методов неразрушающего контроля: термоэдс и вихревых токов // Металлы. – 2020 – N. 6. – С. 41–47.

По названию, цели, задачам, объектам исследования, разработанным автором положениям, научной и практической значимости диссертация соответствует паспорту специальности 1.3.8 - Физика конденсированного состояния согласно пунктам, представленным ниже:

1. Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы и свойств неорганических и органических соединений как в кристаллическом (моно- и

поликристаллы), так и в аморфном состоянии, в том числе композитов и гетероструктур, в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления.

6. Разработка экспериментальных методов изучения физических свойств и создание физических основ промышленной технологии получения материалов с определенными свойствами.

7. Теоретические расчеты и экспериментальные измерения электронной зонной структуры, динамики решётки и кристаллической структуры твердых тел.

Диссертация «Композиты на основе гидрида магния и углеродных нанотрубок для металлгидридных систем очистки и хранения водорода» Эльмана Романа Романовича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Заключение принято на заседании научного семинара Отделения экспериментальной физики Инженерной школы ядерных технологий Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Томский политехнический университет». Присутствовало на заседании 18 чел. Результаты голосования: «за» 18 - чел., «против» 0 - чел., «воздержалось» 0 - чел., протокол № 1 от «06» февраля 2024 г.

Председатель научного семинара
Панин Алексей Викторович,
д.ф.-м.н., профессор,
профессор Отделения экспериментальной физики



подпись

Секретарь научного семинара
Степанова Екатерина Николаевна,
к.т.н.,
доцент Отделения экспериментальной физики



подпись

Ученый секретарь ТПУ
Кулинич Екатерина Александровна,
к.т.н.



подпись