



УТВЕРЖДАЮ

Проректор ТПУ по науке и
стратегическим проектам
к.ф.-м.н.

А.С. Гоголев

« 22 »

2024 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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

Диссертация «Закономерности формирования, структура и свойства материала-накопителя водорода на основе магний/гидрид магния и оксида хрома» 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 Курдюмов Никита, 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 2024 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 Курдюмова Никиты является научно-квалификационной работой, в которой разработаны и теоретически обоснованы новые подходы к улучшению характеристик взаимодействия с водородом композитов на основе гидрида магния с добавлением оксида хрома.

По итогам обсуждения принято следующее заключение.

Актуальность темы и направленность исследования.

Для использования водорода необходим эффективный, безопасный, технически и экономически целесообразный способ его хранения. Гидрид магния можно считать наиболее перспективным материалом для хранения водорода. Однако применение сплавов для хранения водорода на основе гидрида магния ограничено рядом проблем, таких как медленная скорость и высокие температуры процессов сорбции и десорбции

водорода. Добавление переходных металлов, в частности, хрома в процессе механохимического синтеза считается одним из наиболее успешных методов улучшения кинетических свойств гидрида магния при взаимодействии с водородом. Одним из способов доставки наноразмерного оксида хрома на поверхность магния является совместная механохимическая обработка в мельнице гидрида магния и металл-органической каркасной структуры MIL-101(Cr). Таким образом, для разработки новых материалов-накопителей на основе гидрида магния и оксида хрома необходимо проводить комплексные фундаментальные и прикладные исследования, направленные на изучение характеристик материала и микроструктурных изменений в процессе взаимодействия материала с водородом и использование теоретических расчётов из первых принципов для определения энергии связи материала-накопителя водорода на основе гидрида магния и оксида хрома с водородом.

Личное участие соискателя в получении результатов, изложенных в диссертации.

Постановка целей и задач исследования. Сбор и анализ современного состояния науки по исследованиям материалов накопителей водорода на основе гидрида магния с каталитическими добавками и улучшению их свойств. Получение гидрида магния и механохимический синтез композита на его основе с добавлением металлорганических каркасных структур. Проведение экспериментов по изучению сорбционно-десорбционных свойств композита на основе гидрида магния и оксида хрома. Участие в проведении позитронно-аннигиляционных экспериментов на управляемом газовом реакторе. Участие в проведении теоретических расчётов из первых принципов структурной устойчивости и энергии связи атомов системы гидрид магния и оксид хрома.

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 с добавлением каталитических добавок. Опубликованные в рейтинговых изданиях материалы по теме исследования также свидетельствуют о достаточной апробации, подтверждающей достоверность полученных результатов.

Новизна результатов проведенных исследований.

Новизна результатов диссертационной работы заключается в том, что:

1. Показано, что совместная механохимическая обработка в планетарной мельнице гидрида магния и металл-органической каркасной структуры MIL-101 (Cr) приводит к формированию композита со структурой типа «ядро-оболочка», в котором оксид хрома равномерно распределен по поверхности частиц гидрида магния.

2. Впервые показано, что для композита на основе гидрида магния и оксида хрома наблюдается десорбция водорода при температурах, ниже температуры диссоциации гидрида магния.

3. Добавление оксида хрома к гидриду магния приводит как к снижению энтальпии, так и к снижению энергии активации реакции процессов сорбции и десорбции водорода.

4. Впервые произведена оценка фазовых переходов и эволюции дефектной структуры композитной системы на основе гидрида магния и оксида хрома при помощи методов *in situ* в процессе термостимулированной десорбции.

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 12 научных трудах, в том числе 11 статей, индексируемых в базах данных «Сеть науки» (Web of Science) и «Скопус» (Scopus), и 1 статья в журнале, рекомендованном 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.

2. Kudiiarov 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.

3. Lider A., Kudiiarov V., **Kurdyumov N.**, Lyu J., Koptsev M., Travitzky N., Hotza D. Materials and techniques for hydrogen separation from methane-containing gas mixtures // International Journal of Hydrogen Energy. Elsevier BV. – 2023. – Vol. 48, N. 73. – P. 28390–28411.

4. Kudiiarov, Viktor, Elman, R., **Kurdyumov, N.**, 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.

5. 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, N. 13. – Article number 4891.

6. 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.

7. 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.

8. 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.

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

10. Kudiyarov V. N., Elman R. R., **Kurdyumov N. E.**, Pushilina N. S. Study of the Structural-Phase State and Heat Transfer in a Metal Hydride Hydrogen Storage System // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2023. – Vol. 17, N. 6. – P. 1295-1301.

11. Kudiyarov V. N., Elman R. R., **Kurdyumov N. E.**, Pushilina N. S. Structural Features and Phase Transitions in the Process of the Dehydrogenation of a Composite Based on Magnesium Hydride and Carbon Nanotubes // Journal of Surface Investigation: X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. Pleiades Publishing Ltd. – 2023. – Vol. 17, N 6. – P. 1383–1387.

12. Kudiyarov 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.

Соответствие содержания диссертации избранной специальности.

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 «Закономерности формирования, структура и свойства материала-накопителя водорода на основе магний/гидрид магния и оксида хрома» Курдюмова Никиты 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 № 2 от «06» февраля 2024 г.

Председатель научного семинара
Панин Алексей Викторович,
д.ф.-м.н., профессор,
профессор ОЭФ ИЯТШ ТПУ



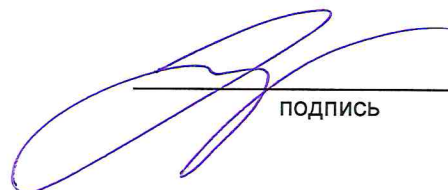
подпись

Секретарь заседания
Степанова Екатерина Николаевна,
к.т.н.
доцент ОЭФ ИЯТШ ТПУ



подпись

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



подпись

Зав ОЭФ
