

**РЕШЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА УрФУ 1.4.01.01  
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ  
КАНДИДАТА НАУК**

от «22» сентября 2022 г. № 12

о присуждении **Захарову Дмитрию Михайловичу**, гражданство Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «**Изотопный обмен водорода между метаном газовой фазы и оксидными материалами на основе скандата лантана**» по специальности **1.4.4. Физическая химия** принята к защите диссертационным советом УрФУ 1.4.01.01 21 июня 2022 г. протокол № 10.

Соискатель, **Захаров Дмитрий Михайлович**, 1992 года рождения, в 2017 г. окончил ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» по направлению подготовки 04.04.01 Химия; в 2021 году окончил очную аспирантуру ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук по направлению 04.06.01 Химические науки (Физическая химия); работает в должности научного сотрудника в лаборатории сквозных технологий в распределенной энергетике «ИнЭнерджи» ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук.

Диссертация выполнена в лаборатории твердооксидных топливных элементов ФГБУН Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения Российской академии наук, Министерство науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – доктор химических наук, доцент **Ананьев Максим Васильевич**, АО «Государственный научно-исследовательский и проектный институт редкометаллической промышленности «Гиредмет»,

отделение материалов для накопителей и преобразователей энергии, начальник отделения.

Официальные оппоненты:

**Конышева Елена Юрьевна**, доктор химических наук, старший научный сотрудник, ФГБУН Институт металлургии УрО РАН (г. Екатеринбург), лаборатория статики и кинетики процессов, ведущий научный сотрудник;

**Укше Александр Евгеньевич**, доктор физико-математических наук, ФГБУН Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН (г. Черноголовка Московской обл.), лаборатория твердотельных электрохимических систем, старший научный сотрудник;

**Еремеев Никита Фёдорович**, кандидат химических наук, ФГБУН Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН» (г. Новосибирск), отдел гетерогенного катализа, научный сотрудник дали положительные отзывы на диссертацию.

Соискатель имеет 31 опубликованную работу, в том числе по теме диссертации 10 работ, из них 4 статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, входящих в международные реферативные базы данных и системы цитирования Scopus и WoS. Общий объем опубликованных работ по теме диссертации 3.375 п.л. / 1.12 п.л. – авторский вклад.

*Статьи, опубликованные в рецензируемых научных журналах и изданиях, определенных ВАК РФ и Аттестационным советом УрФУ:*

1. Ananyev, M. V. H/D isotopic exchange between methane and a proton-conducting oxide: theory and experiment / M. V. Ananyev, **D. M. Zakharov** // Catal. Sci. Technol. – 2020. – V. 10. – P. 3561–3571. (0.75 п.л. / 0.38 п.л.) Scopus, WoS.
2. **Zakharov, D. M.** Catalytic methane activation over  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{ScO}_{3-\alpha}$  proton-conducting oxide surface: A comprehensive study / **D. M. Zakharov**, N. A. Zhuravlev, T. A. Denisova, A. S. Belozerov, A. Y. Stroeva, E. G. Vovkotrub, A. S. Farlenkov, M. V. Ananyev // J. Catal. – 2021, – V. 394, – P. 67–82. (1.00 п.л. / 0.13 п.л.) Scopus, WoS.

3. **Zakharov, D. M.** H/D isotopic exchange and electrochemical kinetics of hydrogen oxidation on Ni-cermets with oxygen-ionic and protonic electrolytes / **D. M. Zakharov**, E. S. Tropin, D. A. Osinkin, A. S. Farlenkov, N. M. Porotnikova, M. V. Ananyev // J. Power Sources. – 2022. – V. 517. – P. 230708. (0.625 п.л. / 0.11 п.л.) Scopus, WoS.
4. **Zakharov, D. M.** Methane dissociation mechanism on Ni-La<sub>1-x</sub>Sr<sub>x</sub>ScO<sub>3-a</sub> cermet for proton ceramic electrochemical devices / **D. M. Zakharov**, M. V. Ananyev // Int. J. Hydrogen Energ. – 2022. – V. 47. – P. 16824–16839. (1.00 п.л. / 0.5 п.л.) Scopus, WoS.

На автореферат поступило 5 положительных отзывов: от заведующего кафедрой электрохимии химического факультета ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», д.х.н., чл.-корр. РАН **Антипова Евгения Викторовича**, г. Москва; научного руководителя АО «Гиредмет» имени Н.П. Сажина, д.ф.-м.н., проф. **Пархоменко Юрия Николаевича**, г. Москва; ведущего научного сотрудника, заведующего лабораторией Ионики твердого тела ФГБУН Институт химии твердого тела УрО РАН, к.х.н. **Сунцова Алексея Юрьевича**, г. Екатеринбург; доцента кафедры физической и неорганической химии Института естественных наук и математики ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого президента России Б.Н. Ельцина», к.х.н., **Киселева Евгения Александровича**, г. Екатеринбург; ведущего научного сотрудника ФГБУН Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН, д.ф.-м.н. **Гаврилюка Александра Львовича**, г. Екатеринбург.

Отзывы содержат следующие критические замечания и вопросы: о возможности применения разработанных автором представлений к другим протон-проводящим оксидам (Антипов Е.В); о причинах использования низких давлений метана и водорода и возможности поведения эксперимента в условиях, соответствующих режимам работы протонно-керамических

электрохимических устройств; об осуществлении контроля за содержанием воды в газовой фазе и ее влиянии на протекание процессов (Пархоменко Ю.Н.); о влиянии увеличения содержания стронция в оксидах на распределение вакансий кислорода в образцах и процесс адсорбции водорода; о причинах наблюдавшихся различий в механизмах обмена водорода между водородом и керметами разного состава; замечание о некорректной записи реакции полной диссоциации метана (Сунцов А.Ю); об экспериментальных или теоретических обоснованиях положений теории пяти типов обмена, о смысле и определении *c*-параметров для выбора физико-химической модели и их математическом виде; о применимости теории пяти типов обмена и физико-химических моделей для описания экспериментальных данных при некоторых температурах и об источниках информации о различной энергии связи адсорбционных форм метана и водорода; замечания о пропущенных коэффициентах и отсутствии указания ошибок экспериментальных данных (Киселев Е.А.); о причинах выбора указанной топологии нейронной сети; о критериях выбора максимальных и минимальных значений для нормировки входных данных нейронной сети; о наименовании программного обеспечения использованного для обучения нейронной сети; замечания об опечатках в формулах и некорректности использования некоторых математических обозначений; замечания об использовании математических обозначений, не являющихся общепринятыми, а также об использовании неудачных обозначений для матриц весов нейронов в тексте диссертационной работы (Гаврилюк А.Л.)

**Выбор официальных оппонентов** обосновывается компетентностью Конышевой Е.Ю. в области физической химии, а именно научными достижениями при изучении физических и химических свойств сложных оксидных соединений, включая протон-проводящие материалы; компетентностью Укше А.Е. в области химической физики, а именно научными достижениями при исследовании физических и химических свойств

твердого тела, включая композитные электрохимические материалы, с использованием математического моделирования; компетентностью Еремеева Н.Ф. в области физической химии, а именно научными достижениями при исследовании каталитических свойств твердых оксидных катализаторов методами изотопного обмена, что подтверждается публикациями в высокорейтинговых научных журналах.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук соответствует требованиям п.9 Положения о присуждении ученых степеней в УрФУ и является научно-квалификационной работой, в которой, на основании выполненных автором исследований, содержится решение задачи выявления механизма взаимодействия метана с оксидными электрохимическими материалами на основе скандата лантана, что имеет весомое значение для развития физической химии.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат **новые научные результаты** и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

– Разработана теория пяти типов обмена, которая позволяет описывать кинетику перераспределения изотопов водорода между молекулами газовой фазы, содержащими четыре атома одного сорта и конденсированной фазой. Показана применимость разработанной теории для выявления механизма массопереноса между метаном и протон-проводящими оксидами на основе скандата лантана.

– Разработана методика экспериментов по изотопному обмену водорода между метаном и протон-проводящими материалами для смесей метана и водорода с различным соотношением компонентов в смеси. Предложен способ расчета концентрации компонентов газовой фазы, включая

изотопологи метана, из данных масс-спектрометрии на основе методов машинного обучения.

– Предложены физико-химические модели диссоциативной адсорбции метана для описания кинетики обмена водорода между метаном и стронций-замещенными скандатами лантана и керметом  $\text{Ni-La}_{0.90}\text{Sr}_{0.10}\text{ScO}_{2.95}$ . Предложены модели для описания кинетики обмена водорода между молекулярным водородом и керметами  $\text{Ni-La}_{0.90}\text{Sr}_{0.10}\text{ScO}_{2.95}$  и  $\text{Ni-Zr}_{0.82}\text{Y}_{0.18}\text{O}_{1.91}$ .

– Выявлены скорость-определяющие стадии обмена водорода в системах «метан–оксид», «молекулярный водород–кермет» и «метан–водород–кермет». Обосновано существование адсорбционных форм метана на поверхности исследуемых объектов и инкорпорирование водорода из метана газовой фазы в структуру перовскитов на основе скандата лантана.

Диссертация является фундаментальным исследованием в области физической химии. Сделанные научные выводы способствуют развитию теории изотопного обмена водорода в системе «газ–конденсированная фаза» для исследования новых классов твердооксидных электрохимических материалов и композитов на их основе, обладающих протонной проводимостью; результаты могут использоваться при разработке методик исследования изотопного обмена с анализом изотопного состава газовой фазы, а также в материаловедении для поиска и модификации перспективных материалов топливного электрода протонно-керамических электрохимических устройств.

На заседании 22 сентября 2022 г. диссертационный совет УрФУ 1.4.01.01 принял решение присудить **Захарову Д.М.** ученую степень кандидата химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет УрФУ 1.4.01.01 в количестве 18 человек, из них 5 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 23 человек,

входящих в состав совета, проголосовали: за – 18, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель диссертационного  
совета УрФУ 1.4.01.01



Черепанов

Владимир Александрович

Ученый секретарь диссертационного  
совета УрФУ 1.4.01.01

нот

Кочетова

Надежда Александровна

22.09.2022