

МИНОБРНАУКИ РОССИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ИНСТИТУТ ОБЩЕЙ И НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ им. Н.С. КУРНАКОВА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК
(ИОНХ РАН)

119991, г. Москва, Ленинский проспект, 31. Тел. (495) 952-0787, факс (495) 954-1279, E-mail: info@igic.ras.ru

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации И.В. Гренева

«Адсорбция молекулярного водорода на алюмофосфатных и алюмосиликатных цеолитах: определение потенциала межмолекулярного взаимодействия для расчета структурных параметров и адсорбционных свойств», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия»

Диссертация И.В. Гренева посвящена исследованию адсорбции молекулярного водорода на алюмофосфатных и алюмосиликатных цеолитах. Сами цеолиты находят свое применение в многочисленных каталитических процессах, хроматографии, задачах газоразделения и очистки воздуха и воды, в энергетической и химической промышленности. Микропористая структура цеолитов во многом определяет их адсорбционные, каталитические и ионообменные свойства. Привлечение методов молекулярного моделирования является традиционным методом исследования сорбционных процессов. В данной работе эти методы используются для области изотерм адсорбции при малых давлениях сорбата, в так называемой области Генри, которая весьма информативна для исследования взаимодействия исключительно молекул сорбата с атомами сорбента, исключая взаимодействия сорбат - сорбат. Одной из целей работы автора является поиск констант межмолекулярного взаимодействия и параметров пористой структуры цеолитов, которые могут быть использованы для уточнения месторасположения катионов в структуре. Актуальность исследования определяется как научным, так и практическим интересом к исследуемым системам, а исследовательские работы в этом направлении активно ведутся в России и за рубежом.

В ходе выполнения работы автором предложены два подхода к моделированию потенциала взаимодействия H_2 - канал цеолита, различающиеся степенью детализации структуры цеолитов, и показана принципиальная возможность использования адсорбционных методов для определения массовой доли компонент в смесях цеолитов AIPO-n. С помощью дискретного подхода рассчитан потенциал адсорбционного взаимодействия H_2 с атомами структуры алюмофосфатных цеолитов и

определена изопотенциальную поверхность, описывающая форму микроканалов. Сопоставление расчетных и экспериментальных значений констант Генри для систем H_2 - AlPO свидетельствует о применимости предложенной модели и использованных в расчетах констант межмолекулярного взаимодействия. В работе проведена оценка влияния квантовых свойств водорода на парное адсорбционное взаимодействие на основе сравнения классической модели потенциала 6-12 и модели эффективного потенциала Феймана – Гиббса: показано, что при расчете адсорбционных параметров в системе H_2 - AlPO-п при 77К необходимо учитывать квантовую природу взаимодействующих частиц даже в области предельно низких давлений, где взаимодействием сорбат - сорбат можно пренебречь. Для цеолитов H-ZSM-5 с модулем 35.4 и 17 на основе расчет адсорбционного потенциала показана взаимосвязь адсорбционных свойств элементарной ячейки ZSM-5 от расположения атомов алюминия в структуре. Полученные результаты могут быть использованы для уточнения месторасположения катионов, в том числе и кислых центров, в структуре цеолита.

В автореферате, однако, отсутствует какой-либо комментарий по поводу специфики описания адсорбционных свойств молекулярного водорода при низких температурах в данных системах по сравнению с другими системами.

Сделанное замечание не снижает общего впечатления от работы, и содержание автореферата позволяет сделать вывод о том, что диссертационное исследование Гренева Ивана Васильевича «Адсорбция молекулярного водорода на алюмофосфатных и алюмосиликатных цеолитах: определение потенциала межмолекулярного взаимодействия для расчета структурных параметров и адсорбционных свойств», представляет собой законченную работу, выполненную на высоком уровне, отвечающую требованиям ВАК, а соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия».

Ведущий научный сотрудник
лаборатории квантовой химии
Института общей и неорганической
химии им. Н.С. Курнакова, РАН
доктор физико – математических наук
e-mail: tovbin@nifhi.ru

Ю.К.Товбин

