

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Гренева Ивана Васильевича «Адсорбция молекулярного водорода на алюмофосфатных и алюмосиликатных цеолитах: определения потенциала межмолекулярного взаимодействия для расчета структурных параметров и адсорбционных свойств», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности: 02.00.04 – физическая химия.

Алюмосиликатные (ZSM-5) и алюмофосфатные (AlPO-n) цеолиты находят широкое применение в качестве катализаторов различных нефтехимических процессов. В связи с этим актуальность диссертационной работы Гренева И.В., посвященной исследованию адсорбционного взаимодействия молекулярного водорода с данными цеолитами, расчету потенциала межмолекулярного взаимодействия, позволяющего уточнить параметры микропористого пространства цеолита и рассчитать основные адсорбционные свойства, сомнений не вызывает.

В соответствии с поставленной целью автор уделяет особое внимание экспериментальному адсорбционному исследованию ряда алюмофосфатных и алюмосиликатных цеолитов, моделированию адсорбционного потенциала взаимодействия для системы H_2 -AlPO-n, проведенного на основе интегрального и дискретного подхода, а также моделированию адсорбционного потенциала взаимодействия для системы H_2 -ZSM-5, проведенного на основе дискретного подхода.

В работе рассмотрены два подхода к моделированию потенциала взаимодействия H_2 – канал цеолита, различающиеся степенью детализации структуры цеолитов. Интегральный подход позволил получить аналитическое выражение для потенциала адсорбционного взаимодействия сорбата в модельном цилиндрическом канале. Показана принципиальная возможность использования адсорбционных методов для определения массовой доли компонент в смесях цеолитов AlPO-n. Дискретный подход позволил рассчитать

потенциал адсорбционного взаимодействия H_2 с атомами структуры алюмофосфатных цеолитов и определить изопотенциальную поверхность Φ^0 , которая описывает форму микроканалов. Рассчитаны значения доступных и предельных геометрических объемов микропор. Определены места преимущественной локализации молекул сорбата в канале цеолитов.

По автореферату имеется следующее замечание:

На основании данных рис. 6 (зависимости константы Генри от местоположения одного атома Al в решетке) остается неясным, можно ли экспериментально определить количество атомов Al в элементарной ячейке реального цеолита ZSM-5.

Однако вышеизложенное замечание не снижает ценность новой и важной для химии и народного хозяйства работы. По актуальности, новизне, научному уровню и практической значимости полученных результатов работа Гренева Ивана Васильевича соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в том числе п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 года № 842, и другим требованиям ВАК., а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Главный научный сотрудник
ФГБУН Института химии твердого тела
и механохимии Сибирского отделения
Российской академии наук,
доктор химических наук, профессор
e-mail: yukhin@solid.nsc.ru
630128, г. Новосибирск,
Ул. Кутателадзе, 18
Тел. (383)223-24-10, доб. 1105

Ю. Юхин

Юхин Юрий Михайлович

Подпись Юхина Ю.М. заверяю
Ученый секретарь ИХТГМ СО РАН
д.х.н.



Т. Шахтшнейдер Шахтшнейдер Татьяна Петровна