

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Гренева Ивана Васильевича “Адсорбция молекулярного водорода на алюмофосфатных и алюмосиликатных цеолитах: определение 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

Диссертационная работа Гренева И.В. направлена на изучение адсорбции H_2 при 77 К на цеолитах, широко используемых в химической промышленности, с целью расчета потенциала межмолекулярного взаимодействия. Приведенные в реферате результаты позволяют уточнить параметры микропористого пространства цеолитов, определить места локализации сорбата для области изотермы Генри и рассчитать ряд адсорбционных свойств. Можно полагать, что проведенные исследования актуальны для современного состояния физической химии поверхностных явлений.

К достоинствам работы можно отнести наличие экспериментальных исследований и теоретического моделирования адсорбционных процессов, сопоставление результатов которых позволило автору добиться достоверности полученных результатов.

Диссертантом предложены 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. На основе сопоставления экспериментально измеренных и расчетных значений констант Генри K_H в микропорах алюмофосфатов $AlPO_n$ при 77К определены эффективные значения констант межмолекулярного взаимодействия для системы H_2 – $AlPO_n$. Получена расчетная зависимость $K_H(d)$, которая позволила описать адсорбционные свойства ряда алюмофосфатных цеолитов. 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. Сопоставление расчетных и экспериментальных значений констант Генри для систем H_2 – $AlPO$ свидетельствует о применимости предложенной модели и использованных в расчетах констант межмолекулярного взаимодействия.

Отмечу, что материалы диссертации опубликованы в авторитетных отечественных и зарубежных журналах, прошли апробацию на ряде научных конференций.

Вместе с тем, из текста реферата неясными остались следующие положения:

1. Насколько универсальна зависимость константы Генри от размера микроканала (рис. 2) для других микропористых материалов, например, активированных углей.
2. Могут ли предложенные в работе подходы вместе с полученными константами межмолекулярного взаимодействия быть использованы для моделирования адсорбционных свойств цеолитов при более высоких давлениях, например, методом Монте-Карло.

В целом диссертацию Гренева И.В. следует рассматривать как научную квалификационную работу, которая по актуальности, новизне, научной ценности результатов, по уровню обоснованности выводов вполне удовлетворяет требованиям и критериям п. 9. Положения ВАК о порядке присуждения ученых степеней.

Считаю, что автор диссертационной работы Гренев Иван Васильевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 - физическая химия.

Заведующий лабораторией
низкотемпературной теплофизики (№ 1.3) ИТ СО РАН,
член-корр. РАН, д. ф.-м. н.
(моб. тел. 89139201248,
электронная почта: pavl@itp.nsc.ru).



Павленко
Александр Николаевич

Личную подпись Павленко А.Н. заверяю.
Ученый секретарь ИТ СО РАН

05.10.2018



Макаров М.С.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт теплофизики им. С.С. Кутателадзе
Сибирского отделения Российской академии наук (ИТ СО РАН)
Адрес: РФ, 630090, г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, д. 1.
Телефон: +7(383) 330-90-40
Факс: +7(383) 330-84-80
E-mail: director@itp.nsc.ru
Сайт: <http://www.itp.nsc.ru>