

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 003.051.01 НА БАЗЕ  
Федерального государственного бюджетного учреждения науки  
Института неорганической химии имени А.В. Николаева  
Сибирского отделения Российской академии наук, Минобрнауки России  
ПО ДИССЕРТАЦИИ **Гренева Ивана Васильевича**  
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ  
КАНДИДАТА ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение диссертационного совета от 17 октября 2018 года № 15

О присуждении *Греневу Ивану Васильевичу*, гражданину Российской Федерации ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация *«Адсорбция молекулярного водорода на алюмофосфатных и алюмосиликатных цеолитах: определение потенциала межмолекулярного взаимодействия для расчета структурных параметров и адсорбционных свойств»* в виде рукописи по специальности 02.00.04 – физическая химия (физико-математические науки) принята к защите *30 мая 2018 г., протокол № 10* диссертационным советом Д 003.051.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (**ИНХ СО РАН**), (630090, г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, д. 3, действующего на основании приказа Минобрнауки РФ от 11.04.2012 № 105/нк).

Соискатель *Гренев Иван Васильевич*, 1989 года рождения, в 2013 году окончил ФГБОУ ВО «Новосибирский национальный исследовательский государственный университет» по специальности – физика. В период с 2013 по 2017 год обучался в очной аспирантуре Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук (**ИК СО РАН**). На момент защиты диссертации работает младшим научным сотрудником в группе исследования адсорбции и пористости ИК СО РАН.

Диссертация выполнена в лаборатории адсорбции в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Института катализа им. Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук.

*Научный руководитель* – доктор химических наук *Гаврилов Владимир Юрьевич* работает в группе исследования адсорбции и пористости ИК СО РАН в должности ведущего научного сотрудника.

*Официальные оппоненты:*

– *Мышлявцев Александр Владимирович*, гражданин России, доктор химических наук, профессор, проректор по учебной работе Федерального государственного бюджетного

образовательного учреждения высшего образования «Омский государственный технический университет», г. Омск;

– *Окунев Борис Николаевич*, гражданин России, доктор физико-математических наук, доцент Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», г. Москва; дали **положительные** отзывы на диссертацию.

*Ведущая организация* Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук (**ФТИ им. А.Ф. Иоффе**), г. Санкт-Петербург, в своем **положительном заключении**, утвержденном ВрИО директора ФТИ им. А.Ф. Иоффе д.ф.-м.н. Лебедевым Сергеем Владимировичем и составленным ведущим научным сотрудником лаборатории новых неорганических материалов д.х.н., профессором Устиновым Е.А. указала, что: «...Работа в целом является законченным и востребованным этапом в развитии подходов к анализу структуры цеолитов и других нанопористых материалов. Диссертационная работа соответствует требованиям п.9 Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук. Автор диссертации Гренев Иван Васильевич заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Отзыв на диссертацию заслушан и обсужден на семинаре лаборатории Новых неорганических материалов ФТИ им. А.Ф. Иоффе 7 июня 2018г., протокол № 5».

По теме диссертации соискатель имеет 6 работ, опубликованных в рецензируемых научных журналах, из них 3 – в российских рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ, и 3 – в зарубежных рецензируемых журналах; все публикации входят в перечень журналов, индексируемых в международной информационно-аналитической системе научного цитирования Web of Science и 6 тезисов докладов опубликованных в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов. Общий объем опубликованных работ составляет 52 стр. (3.25 усл. печ. л.).

*Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:*

**1. Grenev I.V., Gavrilov V.Yu. Calculation Adsorption Properties of Aluminophosphate and Aluminosilicate Zeolites // Adsorption. 2017. V. 23. N 6. P. 903-915.**

**2. Grenev I.V., Gavrilov V.Yu. Adsorption interaction in H<sub>2</sub> - ZSM-5 system and calculation of the zeolite microchannel parameters // Microporous and mesoporous materials. 2016. V.226. P. 146-152.**

**3. Grenev I.V., Gavrilov V.Yu. Calculation of microchannel parameters in aluminophosphate zeolites // Microporous and mesoporous materials. 2015. V. 208. P. 36-43.**

На диссертацию и автореферат диссертации поступило 6 отзывов. Все отзывы положительные, 5 – с замечаниями и 1 – без замечаний. Отзывы поступили от:

*чл.-к. РАН, д.ф.-м.н., профессора Опарина В.Н.*, заведующего отделом экспериментальной геомеханики и *к.т.н. Куряевой Т.А.*, старшего научного сотрудника лаборатории обогащения полезных ископаемых и технологической экологии ФГБУН Института горного дела СО РАН (г. Новосибирск); *к.х.н., доцента Вишнякова А.М.*, сотрудника центра по научным и инженерным вычислительным технологиям для задач с большими массивами данных Сколковского института науки и технологий (г. Москва); *д.х.н., профессора Юхина Ю.М.* главного научного сотрудника ФГБУН Института химии твердого тела и механохимии СО РАН (г. Новосибирск); *д.ф.-м.н. Товбина Ю.К.* ведущего научного сотрудника лаборатории квантовой химии ФГБУН Института общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН (г. Москва); *д.ф.-м.н., профессора Хейфеца Л.И.* ведущего научного сотрудника кафедры химической технологии и новых материалов Химического факультета МГУ им. М.В.Ломоносова (г. Москва).

Большинство замечаний к автореферату относятся к возможности расширения предложенных в работе методик и полученных выводов на другие системы, в том числе для других сорбатов и микропористых материалов, а также к используемой терминологии. Все отзывы заканчиваются выводом, что диссертационная работа И.В. Гренева **полностью соответствует** требованиям, которые ВАК РФ предъявляет к кандидатским диссертациям, а её автор И.В. Гренев заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

*Выбор официальных оппонентов и ведущей организации* обосновывается компетентностью оппонентов в области исследования физической химии поверхностных явлений. Данные компетенции подтверждаются наличием публикаций оппонентов и сотрудников ведущей организации в данной области исследований.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

– *определены* эффективные значения констант межмолекулярного взаимодействия для системы  $H_2 - AlPO_4$  в рамках интегрального подхода на основе сопоставления экспериментально измеренных и расчетных значений констант Генри  $K_H$ ;

– *рассчитаны* потенциалы межмолекулярного взаимодействия для систем  $H_2 -$  цеолит на основе дискретного подхода и определены изопотенциальные поверхности  $\Phi^0$ , которые описывают форму микроканалов;

– *определены* места преимущественной локализации молекул сорбата в каналах исследуемых цеолитов;

– *проведена* оценка влияния квантовых свойств водорода на парное адсорбционное взаимодействие на основе сравнения классической модели потенциала 6-12 и модели эффективного потенциала Феймана – Гиббса для систем  $H_2$  – цеолит при 77 К;

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

– *предложены* два подхода к моделированию потенциала взаимодействия  $H_2$  – канал цеолита, различающиеся степенью детализации структуры цеолитов;

– *показана* взаимосвязь адсорбционных свойств системы  $H_2$  – ZSM-5 от расположения атомов алюминия в структуре;

– *показано*, что для расчета адсорбционных параметров в системе  $H_2$  – AlPO-n / ZSM-5 при 77 К необходимо учитывать квантовую природу взаимодействующих частиц даже в области предельно низких давлений, где взаимодействием сорбат – сорбат можно пренебречь;

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

– *получена* расчетная зависимость величины константы Генри от размера канала  $K_H(d)$ , которая позволяет предсказывать адсорбционные свойства алюмофосфатных цеолитов;

– *показана* принципиальная возможность использования предложенных адсорбционных методов для определения массовой доли компонент в смесях цеолитов AlPO-n;

– *показано*, что совокупность экспериментальных и расчетных адсорбционных методов может быть использована для определения месторасположения катионов в структуре микропористых цеолитов.

**Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:**

– *для экспериментальных работ* использовался комплекс независимых физико-химических методов исследования: адсорбционные методы для исследования адсорбции  $H_2$  и  $N_2$  при 77 К, рентгенофазовый и химический анализ для исследования микропористых материалов;

– *для теоретического расчета* адсорбционных параметров в исследуемых системах использовались статистические и термодинамические методы, а рассчитанные величины констант Генри согласуются с экспериментально измеренными значениями для всех исследованных в работе цеолитов;

– *проведена* апробация работы на 6 научных конференциях различного уровня, включая специализированные международные; материалы по результатам работы успешно прошли рецензирование в тематических научных журналах.

**Личный вклад соискателя состоит в том, что:** Автор непосредственно участвовал в проведении рентгенофазового анализа исследуемых образцов и адсорбционных экспериментов, в обработке полученных результатов, написании пакета прикладных программ для расчета потенциала межмолекулярного взаимодействия, а также в расчете адсорбционных констант Генри. Соискатель участвовал в постановке задач, решаемых в диссертации, в обсуждении полученных результатов, в подготовке научных публикаций. Лично выступал на научных семинарах, конференциях и конкурсах с материалами работы.

Диссертационный совет Д 003.051.01 на базе ИНХ СО РАН на заседании 17 октября 2018 г., протокол №15, пришел к выводу о том, что диссертация соответствует п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», т.е. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой решена задача определения потенциала межмолекулярного взаимодействия для расчета структурных параметров и адсорбционных свойств молекулярного водорода на алюмофосфатных и алюмосиликатных цеолитах, принято решение присудить *Грневу Ивану Васильевичу* ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 25 (двадцати пяти) человек, из них 12 (двенадцать) докторов наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, участвовавших в заседании и голосовании, из 33 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени – 25 (двадцать пять), против присуждения учёной степени – 0 (нет), недействительных бюллетеней – 0 (нет).

Председатель диссертационного совета  
чл.-к. РАН

Федин Владимир Петрович

Ученый секретарь диссертационного совета  
д.ф.-м.н.

Надолинный Владимир Акимович

17.10.2018 г.