

В диссертационный совет Д003.051.01
Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН
просп. Академика Лаврентьева, 3, Новосибирск 630090

3 сентября 2018 года

ОТЗЫВ на автореферат диссертации

Грёнева Ивана Васильевича:

«АДСОРБЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА НА АЛЮМОФOSФАТНЫХ 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

Работа выполнена в традиционной, устоявшейся области. Цеолиты – основная группа микропористых материалов для разделения и катализа многие десятилетия. В такой области нечасто удается сказать что-то новое, но при этом практическая польза от результатов может быть очень большой, именно за счет масштаба индустрии. Поэтому тема представляется актуальной. В рассматриваемой диссертации автор изучает взаимодействие молекулярного водорода с двумя группами хорошо известных цеолитов методами молекулярного моделирования, проводит термодинамический анализ результатов, сравнивает расчетные данные с экспериментом. Хочется особо отметить идею применения адсорбции водорода для определения положения катионов (зависимость взаимодействия водорода с цеолитами в зависимости от типа и положения катионов ранее практически не изучалась) а также общего контроля качества при производстве цеолитов. Интересен также анализ дискретного метода описания взаимодействий. Насколько я знаю, ранее он не применялся для столь сложных систем.

Приходится, к сожалению, отметить, что реферат написан скучновато. Вывод о систематическом занижении константы Генри эмпирической моделью Леннард-Джонсовского типа по сравнению с моделью Феймана-Гиббса, как мне представляется, отражает несколько устаревшую точку зрения на эмпирические модели. В последние годы более популярен подход «сверху вниз» (top down) когда значения энергетических параметров просто подгоняются под требуемую величину. Автору бы следовало показать, что при подгонке под константу Генри невозможно воспроизвести другие

экспериментальные данные (например, изостерическую теплоту или значение адсорбции при высоких давлениях), чтобы придать этому выводу большую убедительность.

Несмотря на определенные недостатки, диссертация Ивана Васильевича Гренева представляется мне вполне квалифицированной работой, выполненной самостоятельно на хорошем уровне, с обоснованными выводами, имеющими фундаментальное и методологическое значение. Считаю, что материал вполне пригоден для защиты, список публикаций приемлем, работа удовлетворяет требованиям и критериям п. 9. Положения ВАК о порядке присуждения ученых степеней, а автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 - "физическая химия".

Доцент, кандидат химических наук
А.М. Вишняков

«Центр по научным и инженерным
вычислительным технологиям для задач с
большими массивами данных»
Сколковский институт науки и технологий
Ул. Нобеля д. 1, Москва 143026
Тел 985 873 3506
Email a.vishnyakov@skoltech.ru

Подпись заверяю:

Руководитель отдела
Контроля и администрирования
Сколковский институт науки и технологий

