

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

экспертной комиссии диссертационного совета Д 003.051.01 на базе ИНХ СО РАН по кандидатской диссертации **ГРЕНЕВА Ивана Васильевича «АДСОРБЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО ВОДОРОДА НА АЛЮМОФОСФАТНЫХ И АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ ЦЕОЛИТАХ: ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЛЯ РАСЧЕТА СТРУКТУРНЫХ ПАРАМЕТРОВ И АДСОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ»**

Комиссия диссертационного совета Д 003.051.01 (по физическим наукам) на базе ФГБУН Института неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН в составе: председателя — доктора физико-математических наук, доцента **Козловой Светланы Геннадьевны**, членов комиссии — доктора физико-математических наук, профессора РАН **Федина Матвея Владимировича** и доктора химических наук, профессора РАН **Мартьянова Олега Николаевича**, в соответствии с п. 25 Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, утвержденного приказом Минобрнауки России от 13 января 2014 г. № 7, на основании ознакомления с кандидатской диссертацией **Гренева Ивана Васильевича** и состоявшегося обсуждения приняла следующее заключение:

1. Соискатель ученой степени кандидата физико-математических наук соответствует требованиям пп. 2-4 Положения о порядке присуждения ученых степеней (утв. Постановлением Правительства России от 24.02.2013 г. №842), необходимым для допуска его диссертации к защите.
2. Диссертация на тему «Адсорбция молекулярного водорода на алюмофосфатных и алюмосиликатных цеолитах: определение потенциала межмолекулярного взаимодействия для расчета структурных параметров и адсорбционных свойств» в полной мере соответствует специальности 02.00.04 – «физическая химия», к защите по которой представлена работа.
3. Основные положения и выводы диссертационного исследования отражены в 6 статьях, опубликованных **Грневым Иваном Васильевичем** в международных и российских рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ, все статьи входят в перечень индексируемых в международной системе научного цитирования Web of Science и в 6 тезисах докладов на российских и зарубежных научных конференциях. Представленные соискателем сведения об опубликованных им работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, достоверны.
4. Оригинальность содержания диссертации составляет более 90% от общего объема текста; цитирование оформлено корректно по всему тексту; заимствованного материала, использованного в диссертации без ссылки на автора либо источник заимствования, не обнаружено; научных работ, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, без ссылок на соавторов, не выявлено.

5. В диссертации исследовано адсорбционное взаимодействие молекулярного водорода с алюмофосфатными (AlPO-n) и алюмосиликатными (ZSM-5) цеолитами. Расчет потенциала межмолекулярного взаимодействия позволил уточнить параметры микропористого пространства цеолитов, определить места преимущественной локализации молекул сорбата для области изотермы Генри и рассчитать основные адсорбционные свойства. Измерения изотерм адсорбции H_2 и N_2 при 77К позволили сопоставить расчетные и экспериментальные значения текстурных параметров и значений констант Генри для плотности адсорбированного в микропорах водорода.

Предложены два способа моделирования потенциала межмолекулярного взаимодействия H_2 – канал цеолита, различающиеся степенью детализации структуры цеолитов. В рамках интегрального подхода получено аналитическое выражение и определены значения эффективных параметров модельного потенциала системы адсорбат – цилиндрический канал переменного диаметра. Рассчитана зависимость величины константы Генри от размера канала $K_H(d)$.

В рамках дискретного подхода для систем H_2 – AlPO-n рассчитан потенциал межмолекулярного взаимодействия, проведена оценка значений доступных и предельных геометрических объемов микропор, определены места преимущественной локализации молекул сорбата в канале цеолитов. Для систем H_2 – ZSM-5 рассчитан потенциал межмолекулярного взаимодействия, показано, что места преимущественной локализации молекул сорбата в канале зависят от мест локализации Т-атомов алюминия в структуре цеолита. Установлена взаимосвязь адсорбционных свойств цеолита ZSM-5 от расположения атомов алюминия в структуре.

Показано, что для расчета адсорбционных параметров в системах H_2 – AlPO-n /ZSM-5 при 77К необходимо учитывать поправку Фейнмана – Гиббса даже в области предельно низких давлений, где взаимодействием сорбат – сорбат можно пренебречь.

Комиссия рекомендует:




1. Принять к защите на диссертационном совете Д 003.051.01 на базе ИНХ СО РАН кандидатскую диссертацию **Гренева Ивана Васильевича** «Адсорбция молекулярного водорода на алюмофосфатных и алюмосиликатных цеолитах: определение потенциала межмолекулярного взаимодействия для расчета структурных параметров и адсорбционных свойств».

2. Утвердить официальными оппонентами:



Мышлявцева Александра Владимировича доктора химических наук, профессора Федерального государственного бюджетного учреждения высшего образования «Омский государственный технический университет», г. Омск.



- Окунева Бориса Николаевича, доктора физико-математических наук, доцента, Федерального государственного бюджетного учреждения высшего образования «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова», г. Москва

3. Утвердить в качестве ведущей организации Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН», г. Санкт-Петербург.

 д. ф. м. н., доцент Козлова Светлана Геннадьевна
 д. ф. м. н., профессор РАН Федин Матвей Владимирович
 д. х. н., профессор РАН Мартьянов Олег Николаевич




заверяю.
секретарь МТЦ СО РАН

д. х. н. Г. В. Романенко
25.2018



секретарь ИНХ СО РАН
" мая 2018 г.


личную подпись О. Н. Мартынова
заверяю.
зам. начальника отдела кадров 
24.05.2018

О. Г. Колотовкина