



Professor Tatiana Kuznetsova
Department of Physics and Technology,
University of Bergen,
Allégaten 55,
N-5007 Bergen
NORWAY

September 18, 2019

ОТЗЫВ

на диссертацию Андреевой Надежды Анатольевны "Исследование ион-молекулярных систем для сорбции парниковых газов методами молекулярного моделирования", предоставленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния.

Диссертация Н.А. Андреевой посвящена разработке и исследованию сорбентов диоксида углерода с использованием методов статистической физике, квантовой механики и прямого физического эксперимента. Тема диссертации особенно релевантна в контексте проблемы всемирного потепления. Работа исследует сорбенты диоксида углерода по четырем направлениям: на основе ионных жидкостей, на основе фуллерена C-60, на основе поверхностно-активных органических веществ и на основе промышленно используемой карбонатной технологии. На момент защиты у аспиранта имеется одиннадцать (11) публикаций в рецензируемых журналах.

Диссертация состоит из введения, литературного обзора, шести глав, заключения и списка использованной литературы. Полный объем диссертации составляет 142 страницы, включая 39 рисунков. Список литературы содержит 258 ссылок.

Научная новизна работы состоит в исследовании новых материалов для решения практически важной задачи: разработки сорбента для поглощения диоксида углерода. Впервые получены термодинамические данные для реакции аминирования и карбоксимидирования исследуемых катионов ионных жидкостей и фуллерена C60. Применение полупирического метода молекулярной динамики PM7-MD для исследования взаимодействия сорбентов с диоксидом углерода в главах 5 и 6 позволяло рассмотреть не только начальные и конечные состояния систем, но и весь моделируемый процесс от начала и до конца.

В работе успешно показано, что эффективность хемосорбции диоксида углерода аминоксидированными катионами ионных жидкостей зависит от положения присоединения аминоксидной группы к катиону и была обнаружена корреляция между термодинамическими потенциалами и распределению электронной плотности по ароматическому гетероциклическому катиону исследуемых ионных жидкостей. Существует корреляция между распределением парциальных зарядов на катионах и полученной в процессе хемосорбции диоксида углерода энергией Гиббса.

Разработаны и впоследствии экспериментально получены новые ионные жидкости с амфифильным анионом, обладающие определенным потенциалом по отношению к захвату CO₂. Предложена и проиллюстрирована с помощью численного моделирования альтернативная циклу сорбции CO₂ оксидом кальция (calcium looping) сорбция солями кальция.

Было продемонстрировано, что аминоксидированный фуллерен C60 обладает сравнимые с моноаминами сорбционные свойства по отношению к CO₂, однако в отличие от водных растворов первичных и вторичных аминов обладает нулевой летучестью. Термодинамика реакции реакции хемосорбции не зависит от степени аминирования фуллерена C60.

Сорбция диоксида углерода в исследованных поверхностно-активных ионных жидкостях происходит за счет электростатического притяжения (физисорбция) между положительно-заряженным центром молекулы CO₂ (атомом углерода) и отрицательно заряженным центром сульфато-анион (атомом кислорода). Соли кальция и бария со слабо координирующими анионами продемонстрировали в несколько раз большую сорбционную емкость по отношению к CO₂ по сравнению с используемой на сегодняшний день технологии карбонизации.

Professor Tatiana Kuznetsova, Department of Physics and Technology, University of Bergen. Mailing address :
Dept. of Physics and Technology, Allég. 55, 5007 Bergen, Norway, Phone : (+47)55583315/(+47)55580000
Fax : (+47)55589440, e-mail : tatyana.kuznetsova@uib.no

Bx, N 09/2-400 от 19.09.2019

В работе было успешно доказано, что математический аппарат термодинамики и квантовой механики может быть успешно применен для предсказания свойств гипотетических химических соединений и материалов, которые на данный момент экспериментально еще не получены. Возможность такого рода отбора способна существенно ускорить цикл разработки. В результате работы достигнуто понимание физико-химических процессов и закономерностей сорбции диоксида углерода.

Основные результаты диссертационной работы представлены на ежеквартальных семинарах и конференциях с международным участием в университетах Сан-Пауло и Порту Аллегре, Бразилия, а также на семинаре кафедры молекулярной биофизики и физики полимеров, Физического факультета СПбГУ. Результаты были использованы для синтеза и предсказания свойств впервые разработанных поверхностно-активных ионных жидкостей на основании сульфато-аниона.

Все это позволяет заключить, что диссертация Андреевой Надежды Анатольевны удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к такого рода работам, а диссертант, несомненно, заслуживает присуждения ей искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 — физика конденсированного состояния.

Tatiana Kuznetsova

Кандидат физ-мат наук, Dr. Scientarium
профессор Института Физики и Технологии
Университета Бергена, Норвегия