

Отзыв

члена диссертационного совета на диссертацию Андреевой Надежды Анатольевны
на тему:

ИССЛЕДОВАНИЕ ИОН-МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ СОРБЦИИ ПАРНИКОВЫХ ГАЗОВ МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ,

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Хорошо известно, что глобальное изменение климата Земли связано с увеличением в атмосфере диоксида углерода. Поэтому поиск способов борьбы с увеличением количества CO_2 в атмосфере является важной практической задачей, которую представляется возможным решать с использованием как экспериментальных, так и расчетных методов. В настоящее время известны и широко используются ряд технологий улавливания углекислого газа в атмосфере. Однако, безусловно, задача не решена окончательно и поэтому является актуальной проблемой современности. По этой причине целью обсуждаемой диссертации явилась разработка новых эффективных способов реализации хемосорбционных процессов на основе аминомодифицированных катионов ионных жидкостей и фуллеренов, ионных жидкостей на основе линейных амфифильных анионов, солей кальция и бария. В качестве метода исследования в диссертации используется компьютерное моделирование на базе стандартных программ на основе как квантово-механического, так и классического подходов. Взаимодополняемость используемых рассмотрений делает полученные результаты достаточно надежно установленными фактами. Главными результатами, полученными в работе, являются исследование и разработка новых материалов в качестве сорбентов для поглощения диоксида углерода – проанализированы аминирование и карбоксимидирование катионов ряда ионных жидкостей, а также фуллерена C_{60} . Выявлены модифицированные катионы ионных жидкостей, которые наиболее эффективно связывают диоксид углерода. Установлено, что присоединение amino и карбоксиамидо групп к фуллерену C_{60} является самоорганизующимся процессом, способствующим увеличению его сорбционных возможностей. Разработанный метод контролируемого отжига позволил изучить способность катионов кальция и бария к увеличению сорбционной емкости по отношению к CO_2 . Таким образом, в работе убедительно продемонстрирована эффективность методов молекулярного моделирования для предсказания и поиска новых ионных сорбентов диоксида углерода с необходимыми физико-химическими свойствами. Работа

неоднократно докладывалась на крупных международных конференциях и семинарах, а также все материалы диссертации опубликованы в 11 статьях (Web of Science).

Диссертация включает в себя введение, 6 глав, выводы и список литературы – 269 наименований. Наиболее важно рассмотреть более подробно результаты, полученные в главах три – шесть, поскольку первые две главы посвящены обзору литературы по обсуждаемой проблеме и описанию расчетных методик, используемых в диссертации. В этих главах автор проявил себя высококвалифицированным специалистом, достаточно хорошо владеющим, как проблемой исследования, так и методами расчета.

Четвертая глава диссертации посвящена исследованию возможностей использования нового сорбента - диоксида углерода на основе фуллерена C_{60} . Здесь подробно рассмотрен механизм сорбции с количественным определением термодинамических потенциалов для реакции присоединения CO_2 к аминомодифицированным фуллеренам и проанализированы возможные пути развития этого направления за счет использования высокой химической активности C_{60} и большой площади поверхности его молекул.

Пятая глава рассматривает сорбцию углекислого газа поверхностно-активными ионными жидкостями, как потенциально возможными средами для решения поставленной в работе задачи. Наряду с квантово-механическими расчетами в диссертации используется полуэмпирический метод молекулярной динамики PM7-MD. Здесь установлено, что сильное электростатическое притяжение между сульфатными группами аниона и CO_2 обеспечивают вероятность захвата CO_2 ионными жидкостями. Показано также, что наличие эфирных групп в последних увеличивает их гидрофильность, что подтверждается экспериментальными данными.

Шестая глава содержит результаты исследований возможностей сорбции диоксида углерода солями кальция и бария – катионами щелочноземельных металлов в присутствии слабо координирующего аниона. Целью молекулярного моделирования было найти анионы, которые не препятствуют CO_2 сближению с катионом, и, следовательно, не блокируют его сорбцию. В этой главе был выполнен поиск глобального минимума энергии системы с использованием технологии отжига и метода PM7-MD. Показано, что кальциевый катион удерживает в первой координационной сфере до 8 молекул CO_2 , тогда как бариевый только 4.

Оценивая диссертацию в целом, следует отметить ее новизну и высокую значимость результатов для решения важной практической задачи – поиска эффективных сорбентов для парниковых газов.

По объему представленного в диссертации материала, актуальности поставленных и решенных задач, предсказательной силы результатов для развития работ в области направленного поиска новых ион-молекулярных систем для сорбции диоксида углерода, диссертация Н.А. Андреевой соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 01.09.2016 № 6821/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском Государственном университете», а ее автор Андреева Надежда Анатольевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния. Пункт 11 указанного Порядка диссертантом не нарушен.

Отзыв подготовлен доктором физико-математических наук, профессором кафедры молекулярной биофизики и физики полимеров физического факультета Санкт-Петербургского Государственного университета Рюмцевым Евгением Ивановичем.

Профессор физического факультета
Федерального государственного
бюджетного образовательного
учреждения высшего образования
«Санкт-Петербургского государственного
университета»
доктор физ.-мат. наук
по специальности 01.04.15 –
теплофизика и молекулярная физика
профессор кафедры
молекулярной биофизики и физики полимеров



Рюмцев Евгений Иванович

20.09.2013

Почтовый адрес:
198504, Россия, Санкт-Петербург, Петродворец,
Ульяновская ул. д. 1,
Физический факультет СПбГУ
<http://phys.spb.ru>
Тел.: +7(812) 428-75-98
Email: rei39@mail.ru