

## ОТЗЫВ

председателя 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

Проблема снижения концентрации парниковых газов, и, в особенности, уменьшения доли  $\text{CO}_2$  в атмосфере Земли, является актуальной и даже глобальной с точки зрения её экологического значения. Для эффективного захвата  $\text{CO}_2$  в настоящее время большое внимание уделяется исследованию механизмов сорбции и разработке новых материалов, способных сорбировать значительное количество углекислого газа, и технологий их эффективного использования. В качестве перспективных направлений сегодня рассматривается поглощение  $\text{CO}_2$  водными растворами аминов, аммиака, ионными жидкостями, связывание углекислого газа с образованием карбонатов и адсорбцию в пористых твердых сорбентах, таких, как цеолиты и фуллерены.

В диссертационной работе Н.А. Андреевой были изучены новые сорбенты диоксида углерода: ионные жидкости, содержащие аминированные катионы, новые поверхностно-активные ионные жидкости, соли кальция и бария, а также аминированный фуллерен  $\text{C}_{60}$ . Исследование структуры, электрических и термодинамических свойств этих сорбентов было проведено с помощью ряда квантово-химических методов: полуэмпирического метода расчета электронной структуры PM7, полуэмпирического метода молекулярной динамики PM7-MD, метода Гауссиан 4 (П4), метода функционала электронной плотности. Использование этих методов позволило рассчитать термодинамические потенциалы в реакциях присоединения аминогруппы и хемосорбции  $\text{CO}_2$  к органическим катионам в ионных жидкостях, проанализировать корреляции термодинамических потенциалов и зарядов на атомах катионов в ионных жидкостях, инфракрасные колебательные спектры модифицированных катионов в ионных жидкостях, термодинамические потенциалы образования аминомодифицированных фуллеренов  $\text{C}_{60}(\text{C}_{60}\text{H}_n(\text{NH}_2)_n)$  и сорбции  $\text{CO}_2$  этими соединениями, электронную структуру соединений  $\text{C}_{60}\text{H}_n(\text{NH}_2)_n$ , связывание  $\text{CO}_2$  солями щелочноземельных металлов.

Основные новые результаты диссертации, выносимые на защиту, состоят в следующем:

- Показано, что эффективность хемосорбции диоксида углерода аминомодифицированными катионами ионных жидкостей зависит от положения

*Вх, № 09/2-395 от 16.09.2019*

присоединения аминогруппы к катиону, и существует корреляция термодинамических потенциалов реакции с распределением электронной плотности на катионах при исследовании аминирования катионов ионных жидкостей. Наиболее термодинамически выгодная реакция аминирования происходит на атоме с наиболее высоким частичным зарядом.

- Выявлены модифицированные катионы ионных жидкостей, которые связывают диоксид углерода энергетически более выгодно, чем широко используемый моноэтаноламин.
- Показано, что аминомодифицированный фуллерен  $C_{60}$  демонстрирует сравнимые с моноаминами сорбционные свойства по отношению к  $CO_2$ , однако, в отличие от водных растворов первичных и вторичных аминов, обладает нулевой летучестью. Присоединение каждой новой амино- и карбоксамидогруппы к фуллерену  $C_{60}$  дает одинаковое приращение термодинамических потенциалов. Это побуждает к присоединению большого количества аминогрупп к фуллерену для увеличения его сорбционных способностей.
- Показано, что соли кальция и бария со слабо координирующими анионами демонстрируют в несколько раз большую сорбционную емкость по отношению к  $CO_2$  относительно используемой на сегодняшний день технологии сорбции  $CO_2$  оксидом кальция.

Эти результаты могут иметь практическое значения для технологий сорбции углекислого газа.

Диссертации Н.А. Андреевой (общим объёмом в 307 м.с., на русском языке – 159 м.с., английская копия -148 м.с.) состоит из Введения, 6 глав, Выводов, Списка сокращений и Литературы. Список литературы включает 269 пунктов. Замечаний по оформлению диссертации не имею. По материалам диссертации автор имеет 11 статей в реферируемых в WoS известных международных журналах, результаты докладывались на семинарах и конференциях с международным участием в университетах Сан-Пауло и Порту Аллегре, Бразилия, а также на семинаре кафедры молекулярной биофизики и физики полимеров СПбГУ.

Диссертация Андреевой Надежды Анатольевны на тему: «Исследование ион-молекулярных систем для сорбции парниковых газов методами молекулярного моделирования» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 01.09.2016 № 6821/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель 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.

Председатель диссертационного совета,  
доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент РАН,  
заведующий кафедрой статистической физики физического факультета СПбГУ  
Щёкин Александр Кимович  
e-mail: akshch@list.ru



/Щёкин А.К./

Дата 12.09.2019