

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Брюханова Ильи Александровича «Влияние наноразмерных включений и химических процессов на механические свойства кристаллических материалов», представленной к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 «Механика деформируемого твёрдого тела».

Диссертация Брюханова Ильи Александровича посвящена рассмотрению образования и развития дислокаций в сплавах алюминия и меди, с одной стороны, и объёмной химической реакции в регулярных порах поликристалла цеолита, с другой. Данный отзыв касается близкого мне по работе второго направления. Несмотря на обилие квантово-механических пакетов, не так широк спектр решений для описания химических превращений в твёрдых кристаллических телах доступными в настоящее время численными методами. С одной стороны, ограничения накладываются необходимостью тестирования как функционалов теории плотности, так и псевдопотенциалов, пригодных одновременно для моделирования этих разных задач – аккуратного расчёта как поверхности энергии химической реакции, так и упругих свойств. С другой стороны, выбор объекта исследования связан с ограничениями по числу атомов группы, которая описывает химическую реакцию и может быть использована для оценки координаты реакции с приемлемым временем расчета. Такие ограничения исследованы в работе и кратко упомянуты в диссертации: например, для случая реакции превращения гидрокарбоната в карбонат, что требует и большего числа катионов для стабилизации двухзарядного аниона карбоната и диффузионной части траектории для передачи второго протона на удалённом центре цеолита. Эти требования значительно удорожают расчёты, поэтому автор ограничился получением гидрокарбоната в порах цеолита, на основании чего уже стало возможным сравнить результаты с экспериментом.

Диссертант с помощью методов молекулярной динамики и квантовой механики исследовал влияние физической и химической адсорбции углекислого газа, и деалюминирования на упругие свойства (модули Юнга, объёмный модуль, коэффициент Пуассона). цеолитов типа X и Y. Также на квантово-механическом уровне с использованием метода изолированного кластера и периодических граничных условий с привлечением теории функционала плотности (DFT) изучен механизм хемосорбции углекислого газа в цеолитах. Методами квантовой механики изучены механизмы химической адсорбции углекислого газа

на внутренней поверхности цеолитов типа X. Сделан вывод, что асимметричные формы карбонатов, обнаруженные в экспериментах по адсорбции углекислого газа в цеолите NaX, представляют собой гидрокарбонат-анионы. Получено выражение, позволяющее определять по данным ИК-спектров асимметрию карбонатов и гидрокарбонатов, образующихся в порах цеолитов. Результаты диссертации могут быть использованы при оценке изменения упругих постоянных цеолитов в процессах адсорбции газовых смесей, содержащих углекислый газ и пары воды. Обнадёживающим можно считать тот результат, что удалось провести моделирование химического процесса и расчёт упругих свойств в рамках одного вычислительного метода.

В качестве замечания можно отметить, что на основе полученных данных недостаточно подчеркнуто превосходство метода функционала плотности над методом молекулярной механики при решении рассматриваемых в диссертации задач. Полагаю, что общий объём работы более, чем достаточен, а обсуждение результатов выполнено на высоком научном уровне.

Считаю, что диссертация «Влияние наноразмерных включений и химических процессов на механические свойства кристаллических материалов» удовлетворяет всем требованиям положения о присуждении ученых степеней в Московском Государственном Университете им М.В. Ломоносова, а её автор – Илья Александрович Брюханов достоин присвоения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 – Механика деформируемого твёрдого тела.

Научный сотрудник Института органической химии им.Н.Д. Зелинского РАН, кандидат химических наук

Солкан 24.05.18 (В.Н. Солкан)

Подпись кхн Солкан В.Н. заверяю

Ученый секретарь Института органической химии им.Н.Д. Зелинского РАН (ИОХ РАН), к.х.н.

И.К. Коршевец

