

## ОТЗЫВ

об автореферате диссертации Брюханова Ильи Александровича  
«Влияние наноразмерных включений и химических процессов  
на механические свойства кристаллических материалов»,  
представленной к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических  
наук по специальности 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела

Диссертационная работа И.А. Брюханова посвящена развитию методов атомистического моделирования механических свойств двух практически важных классов материалов - кристаллических сплавов алюминия и микропористых алюмосиликатных минералов, цеолитов. С точки зрения химика или материалововеда-практика они совсем несхожи. Интересно и существенно то, что автору удалось в обоих случаях описать связь химических превращений кристаллической структуры, исследованных при помощи атомистического моделирования в нано и субнано диапазоне (методы молекулярной динамики, молекулярной механики, квантовохимические расчеты методом функционала плотности и др.), с макроскопическими упругими свойствами материалов. Выявление такой связи важно для широкого круга процессов, от рассмотренной в работе химической реакции в кристалле цеолита, служащего катализатором образования карбонатов/ гидрокарбонатов, до взаимной химической модификации материалов с разным типом проводимости на границах гетеропереходов полупроводниковых приборов (с существенным изменением как электрического потенциала, так и упругих свойств). Таким образом, актуальность работы не вызывает сомнений.

Химику более интересна та часть работы, которая касается цеолитов, на ней я и остановлюсь. Цеолиты находят широкое практическое применение в самых разнообразных областях, от изготовления косметики до улучшения свойств асфальтовых дорожных покрытий. Но наиболее важны, конечно, применения цеолитов как катализаторов (в частности, в нефтехимии и нефтепереработке) и «молекулярных сит»/материалов для газоразделения и газоочистки, в том числе мембранных. В ходе работы катализатор или сорбент, естественно, постепенно меняется – вследствие диффузии, адсорбции малых молекул ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  и др.) и химических превращений (в частности, образования карбонатов из  $\text{CO}_2$ ), появления дефектов структуры. В результате меняются и механические свойства материалов, что сказывается на эффективности процессов. Представляет прямой интерес выявление связи указанных изменений структуры с механическими свойствами. Подчеркну, что выполнение этой работы требовало использования (или разработки) двух видов методов - моделирования



химических реакций в объёме кристалла и расчёта его упругих свойств. При этом автор использовал как существующее программное обеспечение, так и собственные скрипты для обработки результатов. Корректность подхода к описанию реакций образования гидрокарбонатов, катализируемых цеолитами, подтверждается согласием с экспериментальными данными о барьерах активации. Хотелось бы отметить и неплохое согласие с экспериментом противонаправленных изменений упругих модулей при гидратации для щелочных и щелочноземельных форм, соответственно, полученное в работе (рис. 9 автореферата); это можно рассматривать как свидетельство в пользу предложенного механизма экранирования анионов катионами в анионном каркасе щелочных форм цеолитов.

Результаты работы достаточно полно отражены в публикациях в отечественных и зарубежных изданиях.

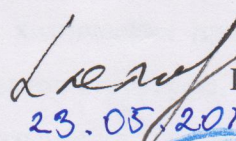
Представляются уместными некоторые замечания.

1. Глава 3 («цеолитная») в автореферате изложена чрезмерно кратко, так что за некоторыми важными деталями приходится обращаться к полному тексту диссертации или публикациям.
2. В автореферате не названы некоторые работы по теме диссертации, в полном тексте перечислено заметно больше. Хотя и оставшихся более чем достаточно, не могу не отметить, что «потерялись» не только некоторые тезисы докладов, но и две журнальные статьи!

Сделанные замечания не снижают ценность работы и не меняют общего положительного впечатления. Считаю, что по своему объёму, новизне, научной и практической значимости работа И.А. Брюханова соответствует требованиям п. 2 «Положения о присуждении ученых степеней в Московском Государственном Университете им М.В. Ломоносова, а автор заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 «Механика деформируемого твёрдого тела».

Ведущий научный сотрудник  
Химического факультета МГУ им. М.В.Ломоносова,  
доктор химических наук, профессор

Подпись в.н.с., проф. И. В. Плетнева заверяю  
И.о. декана химического факультета МГУ  
чл.-кор. РАН, доктор химических наук, профессор

 И.В. Плетнев  
23.05.2018



С.Н. Калмыков