

Отзыв

на автореферат диссертации **Гринева Ильи Викторовича**

«Исследование адсорбционных слоев на плоских и искривленных поверхностях с использованием классического метода функционала плотности», представленный на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 физика конденсированного состояния.

Диссертация Гринева посвящена актуальной теме исследования структуры и свойств адсорбционных слоев на плоских и искривленных поверхностях. Результаты исследований представляют научный интерес для дальнейшего развития теории адсорбции и решения многих прикладных задач, в том числе в области водородной энергетики.

Особого внимания, по нашему мнению, заслуживает последовательное использование перспективного метода функционала плотности при рассмотрении многих проблем, являющихся центральными в современной теории адсорбции, в том числе распределение локальной плотности, изотерм абсолютной и относительной адсорбции и дифференциальных теплот адсорбции газов и паров. При таком подходе физически ясным образом раскрываются особенности возникновения адсорбционных структур и формирования свойств адсорбционных слоев.

Это, по нашему мнению, является значительным шагом в изучении адсорбции и выгодно отличает его от многочисленных попыток описания моно- и полимолекулярной адсорбции в рамках тех или иных предположений, приводящих к известным уравнениям изотерм адсорбции (типа уравнений Генри, Фройндлиха, БЭТ и др.)

Достоинством данной работы, безусловно, является последовательный расчет методом функционала плотности адсорбционных характеристик на адсорбентах с произвольной геометрией (щелевидная пора, поры с цилиндрической и сферической формой).

Автором, с использованием разработанного им метода, основанного на концепции функциональной плотности, проведены численные расчеты приведенной локальной плотности метана на плоской поверхности графита, адсорбции водорода в щелевидной поре графитового адсорбента, а также температурной зависимости изостерических теплот адсорбции водорода на графите. Результаты этих расчетов достаточно хорошо согласуются с наиболее надежными экспериментальными данными.

Для специалистов, работающих в Кабардино-Балкарском государственном университете в области поверхностных явлений в одно- и многокомпонентных системах, в том числе адсорбции в системах с различным характером межчастичных взаимодействий, особый интерес представляют результаты диссертационной работы Гринева И.В., изложенное в третьей главе диссертации и связанные с получением и апробацией ряда адсорбционных потенциалов для адсорбентов с плоскими и искривленными поверхностями.

Автором убедительно показано влияние кривизны поверхности адсорбента на величину одночастичного адсорбционного потенциала. При этом в случае положительной кривизны глубина потенциальной ямы уменьшается с увеличением кривизны. В системах с отрицательной кривизной (внутренние поверхности) имеет место обратная картина.

Публикации Гринева И.П. с соавторами по данной тематике неоднократно обсуждались на научных семинарах в КБГУ и получили высокую оценку.

Достоверность, новизна и практическая значимость результатов, полученных в диссертации, а также ценность научных работ диссертанта Гринева И.В. не вызывают сомнений.

Диссертанту можно рекомендовать продолжение работ по изучению закономерностей адсорбции в рамках классического метода функционала плотности в различных системах адсорбент – адсорбат, в том числе с участием металлов.

Диссертационная работа «Исследование адсорбционных слоев на плоских и искривленных поверхностях с использованием классического метода функционала плотности» удовлетворяет критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842, а ее автор, Гринев Илья Викторович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 физика конденсированного состояния.

Заведующий кафедрой
физических основ микро- и нанoeлектроники
Кабардино-Балкарского государственного
университета им. Х.М.Бербекова,
заслуженный деятель науки РФ,
доктор физико-математических наук,
профессор



А.А.Шебзухов



ПОДПИСЬ Шебзухова А.А.
ЗАВЕРЯЮ
НАЧАЛЬНИК УПРАВЛЕНИЯ КАДРАМИ КБГУ
В.А. КВАШИН



25. 11. 2014

Сведения об авторе отзыва:

Фамилия, имя, отчество : Шебзухов Азмет-гери Аюбович,
Почтовый адрес : 360030, г.Нальчик, ул.Кулиева 4, кв.13,
Телефон: домашний 40-34-23 код (8866-2)
мобильный 8-928-708-54-25

Адрес электронной почты : zav-kfomn@kbsu.ru

Наименование организации : Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М.Бербекова»

Должность : заведующий кафедрой физических основ микро- и нанoeлектроники