

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Пичугиной Дарьи Александровны «Квантово-химическое моделирование активации и превращения малых молекул на нанокластерах и комплексах золота», представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

В диссертации Д.А. Пичугиной «Квантово-химическое моделирование активации и превращения малых молекул на нанокластерах и комплексах золота», представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, проводилось теоретическое исследование механизмов ряда химических процессов, имеющих как фундаментальное, так и прикладное значение. В частности, изучались активационные, адсорбционные и каталитические процессы, протекающие на комплексах золота (I) и (III) различного состава, нейтральных и заряженных малоатомных кластерах золота, биметаллических нанокластерах образованных атомами золота и атомами палладия, серебра, меди, а также на стабилизированных и нанесенных золотых нанокластерах. Решение этих задач проводилось методами теории функционала плотности (ТФП). Объекты исследования представляют собой достаточно хорошие модели гетерогенных катализаторов. Таким образом, не вызывают сомнений актуальность данной работы и ее научная новизна.

В результате выполненных квантово-химических расчетов был установлен механизм взаимодействия молекулярного водорода, кислорода и углеводородов с малоатомными кластерами в зависимости от их элементного состава, структуры, электронного строения и зарядового состояния. На примере взаимодействия Au_{12}/MgO с C_2H_4 и C_2H_2 впервые выявлено влияние носителя на селективность адсорбции. На основе проведенных квантово-химических расчетов разработан инновационный метод извлечения золота из руд.

Результаты исследований по теме диссертации опубликованы в 29 статьях в ведущих российских и международных научных журналах, включенных в перечень ВАК РФ, в 2 главах в монографиях; они неоднократно докладывались на представительных российских и международных конференциях.

В целом диссертация Д.А. Пичугиной выполнена на высоком научно-методическом уровне с использованием современных программных пакетов, реализующих метод ТФП, а основные выводы достаточно хорошо обоснованы. Необходимо отметить, что теоретические результаты, полученные в рецензируемой работе, нашли свое соответствие в экспериментах, выполненных в лабораториях Химического факультета МГУ и в других организациях.

В качестве замечаний к автореферату хотелось бы отметить следующее:

1. Автор проводил моделирование кластеров золота и комплексов на их основе, содержащих 8, 10, 12, 20 и 32 атома. Из автореферата не ясно чем обусловлен выбор именно этих кластеров.

2. Автор рассматривает свойства кластеров $Au_{19}X$, где $X = Ag, Cu, Pd$, однако данные по кластерам $Au_{19}Ag$ и $Au_{19}Cu$ в автореферате отсутствуют. На мой взгляд, следовало бы либо привести характеристики данных кластеров, либо исключить из текста автореферата.

Однако, несмотря на отмеченные недостатки, считаю, что диссертация Д. А. Пичугиной полностью отвечает требованиям, предъявляемым ВАК к докторским диссертациям, и соответствует п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней» правительства РФ от 24.09.2013 №842, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

25 мая 2016 года

Доктор физико-математических наук, специальность 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества, ведущий научный сотрудник лаборатории «Химическая физика наноструктур» Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук
Гришин Максим Вячеславович

Тел.: (495) 939-73-86

Электронный адрес: mvgrishin68@yandex.ru

119991 Москва, ул. Косыгина 4

Собственноручную подпись
сотрудника Гришина М.В.
удостоверяю
Секретарь

