

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Пичугиной Дарьи Александровны**  
**«КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ АКТИВАЦИИ И**  
**ПРЕВРАЩЕНИЙ МАЛЫХ МОЛЕКУЛ НА КЛАСТЕРАХ И**  
**КОМПЛЕКСАХ ЗОЛОТА»**,

представленной на соискание ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

В автореферате Д.А. Пичугиной изложены результаты применения современного теоретического подхода к получению широкого массива данных о реакционной способности частиц, строении интермедиатов реакции и переходных состояний, структурных и размерных эффектов в химических превращениях с участием наночастиц. Эта работа позволила выявить влияние строения и заряда частиц золота на их химические свойства по отношению к молекулярному водороду, кислороду, углеводородами, органическим тиолам, установить механизм и строение активного центра золотосодержащих композитов в ряде важных реакций, таких как: прямой синтез  $H_2O_2$ , селективное гидрирование алкинов и функционализация  $CH_4$ . Данная работа представляет собой исследование строения и свойств кластеров золота и позволяет в едином подходе на кластерных моделях описать активацию молекул и механизм реакций, представляющих интерес для нефтехимических и энергосберегающих технологий. Полученный массив данных позволяет выстроить корреляцию состав – структура – свойство и осуществить прогнозирование свойств соединений золота.

В качестве замечания, можно отметить отсутствие в расчетах кластеров с нечетным числом атомов, что могло бы сделать работу логически более завершенной. Тем не менее, указанное замечание не умаляет достоинств работы.

Оценивая объем проведенных исследований, их научную и практическую значимость, достоверность полученных результатов и глубину сделанных выводов, можно заключить, что представленная диссертационная работа вполне соответствует всем требованиям ВАК, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор Пичугина Дарья Александровна заслуживает присвоения степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

9 июня 2016 года

Ведущий научный сотрудник Института проблем  
химической физики РАН, доктор химических наук  
(специальность 02.00.04)



Зюбина Татьяна Сергеевна

Адрес: 142400, г. Черноголовка, Московская обл., пр. Академика Н.Н. Семенова, д. 1.  
E-mail: [zyubin@icp.ac.ru](mailto:zyubin@icp.ac.ru); Телефон: 84965227511



Зав. канцелярией Зюбина Татьяна Сергеевна

