

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Пичугиной Дарьи Александровны
«Квантово-химическое моделирование активации и превращений малых молекул на
кластерах и комплексах золота»,
представленной на соискание учёной степени доктора химических наук
по специальности 02.00.04 — физическая химия.

Диссертационная работа Пичугиной Д.А. затрагивает важную для развития физической химии, теории адсорбционных процессов и других разделов химической науки тему уникальных свойств малых частиц, в частности кластеров золота. С использованием современных методов квантово-химического моделирования рассмотрено взаимодействие молекулярного водорода и кислорода, алканов и тиолов с кластерами Au_n . Одновременно некоторые расчёты выполнены с привлечением плёночной модели в рамках зонной теории. В связи с этим актуальность темы диссертации не вызывает сомнений.

Установлено, что за активацию адсорбированных на кластерах Au_n частиц ответственны атомы металла с низким координационным числом. Обоснован «эстафетный» механизм диссоциации S-H связи в тиоле, а также механизм гидрирования C_2H_2 в присутствии C_2H_4 . Моделирование процесса активации метана комплексными соединениями золота, а также частицей $Au_{20}O$ позволило объяснить сопряжённое окисление метана при взаимодействии с гомолептическими комплексами золота(III). Отдельного внимания заслуживает проведённое в работе исследование адсорбции аниона $[Au(CN)_2]^-$ на ненасыщенных атомах углерода активированного угля. Полученные данные легли в основу метода, позволяющего повысить степень извлечения золота из руд.

Работа хорошо апробирована на международных и всероссийских конференциях и представлена в двух главах в монографиях, двадцати девяти статьях в журналах, входящих в перечень ВАК РФ и шестидесяти шести тезисах докладов.

Выносимые на защиту положения достаточно полно обоснованы в тексте автореферата. Полученные научные данные являются оригинальными. Текст автореферата и печатные труды отражают основное содержание диссертации.

Замечание

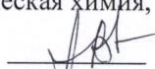
Не вполне ясно, почему для исследования выбраны кластеры Au_n, содержащие 8, 10, 12, 20 и 32 атома золота. Обладают ли именно эти частицы уникальными свойствами или они были экспериментально зафиксированы в исследуемых процессах? Почему не рассмотрены частицы с нечётным числом атомов, которые обладают более высокой активностью?

Данное замечание не снижает научной и практической ценности работы.

Научная новизна, практическая ценность результатов и завершённость исследований позволяют считать, что диссертация «Квантово-химическое моделирование активации и превращений малых молекул на кластерах и комплексах золота» полностью соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к работам на соискание учёной степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 - физическая химия, а её автор Пичугина Дарья Александровна, достойна присуждения учёной степени доктора химических наук.

Заведующий кафедрой физической химии

ФГБОУ ВО «Воронежский государственный университет», доктор химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, профессор

 Введенский Александр Викторович

Тел.: 8(4732)208-546; 8-910-345-1999; alvved@chem.vsu.ru

394693, Воронеж, Университетская пл.1, Воронежский госуниверситет, кафедра физической химии

10 мая 2016 года

