

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».

Диссертационная работа Д.А.Пичугиной посвящена исследованию структуры и физико-химических свойств кластеров и комплексов золота и их соединений квантово-химическими методами. Актуальность работы обусловлена наличием у наночастиц, кластеров и комплексов золота необычных физико-химических, каталитических и оптических свойств, являющихся прямым следствием наличия размерных эффектов, и их широким применением в химической технологии, медицине и создании новых материалов с уникальными свойствами. В связи с этим результаты, представленные в диссертации представляют большой интерес как для фундаментальной физической химии наносистем, так и для прикладных областей физики и химии связанных с получением на основе наночастиц, кластеров и комплексов золота новых технологий и материалов с уникальными свойствами.

Диссертационная работа Д.А.Пичугиной содержит целый ряд новых результатов, относящихся к адсорбционным и каталитическим процессам с участием Au_n , которые представляют значительный интерес для фундаментальной физической химии наносистем и химической технологии. С моей точки зрения, наиболее интересными результатами является обнаружение динамического строения Au_{12} и его изменчивости вследствие активации реагента или химической реакции, исследование допирования Au_n переходными металлами, влияние структуры Au_n и его зарядового состояния на реакционную способность и механизмы взаимодействия с водородом, кислородом и углеводородами, а также каталитический эффект $Au_{19}Pd$ на образование H_2O_2 из H_2 и O_2 .

Основные результаты диссертации получены с использованием ТФП. Хотя спектр используемых методов ТФП ограничивается в большинстве случаев единственным функционалом РВЕРВЕ, используемую методологию следует признать весьма хорошо обоснованной, поскольку РВЕРВЕ является "золотым стандартом" в исследовании кластеров золота, серебра и других металлов методами ТФП, а ТФП, в отличие от дорогостоящих *ab initio* методов, характеризуется менее выраженной зависимостью результатов от величины базисного набора и, во многих случаях, включая РВЕРВЕ, отличным качеством описания экспериментальных вибрационных спектров, термохимических и других характеристик молекул, кластеров и наночастиц в гармоническом (RRHOA) приближении.

Достоверность результатов полученных в диссертации подтверждается систематическим сравнением модельных результатов с экспериментальными данными, наличие которых является несомненным достоинством данной диссертационной работы. Результаты диссертации, которые получены в рамках единого теоретического подхода, полностью согласуются с выносимыми на защиту положениями и выводами.

К числу замечаний, которые, однако, не снижают ценности полученных результатов следует отнести:

(1) недостаточное, на мой взгляд, внимание, уделенное структурным 2D-3D переходам в Au_n . Несмотря на несомненную сложность этой неразрешенной на сегодняшний день проблемы, справедливо отмеченную диссертантом в Главе 1, ее исследование и решение, хотя бы для частных случаев, представляется весьма полезным для определения относительной стабильности чистых кластеров золота и их соединений в зависимости n , химического состава добавок и температуры, которая

может оказывать значительное влияние на относительную стабильность различных изомеров вследствие энтропийных эффектов.

Результаты диссертации апробированы на более чем 50 международных и общероссийских конференциях, и опубликованы в 29 работах, входящих в перечень ВАК, включая 4 публикации (статьи [7, 24, 25, 29] из списка статей по теме диссертации стр. 46-49) в журналах высшего мирового уровня по тематике диссертации (категория Q1, SJR рейтинг). Опубликованные по теме диссертации работы имеют весьма достойные, с учетом высокой конкуренции в области исследований, наукометрические показатели, что свидетельствует о значительном интересе к ее результатам как на национальном, так и на международном уровне.

Практическая значимость результатов диссертации подтверждена документально. В частности, исследование механизмов взаимодействия кластеров Au с S-содержащими органическими соединениями внесло значительный вклад в разработку новой методики синтеза наночастиц Au методами координационной химии, а результаты моделирования адсорбции $[Au(CN)_2]^-$ на активированном явились основой нового химического метода, применяемого в ОАО «Полиметалл», который позволил повысить степень извлечения золота из руды.

Диссертация Д.А. Пичугиной выполнена на высоком научном и методологическом уровне, и представляет собой законченное научное исследование-научно-квалификационную работу, результаты которой имеют важное научное и практическое значение. Диссертационная работа Д.А. Пичугиной удовлетворяет всем требованиям ВАК, а ее автор заслуживает присуждения ей ученой степени доктора химических наук по специальности: 02.00.04 – «физическая химия».



А.Б.Надыкто

ФИО : Надыкто Алексей Борисович

Ученая степень: д.ф.-м.н. по специальностям 05.13.18 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ и 02.00.04 Физическая химия

Почтовый адрес: 127055, Москва, Вадковский пер.,1

Телефон: 8 499 972 9520

Email: anadykto@gmail.com

Должность: главный научный сотрудник

Место работы: Федеральное Государственное Бюджетное Образовательное Учреждение
Высшего Образования Московский Государственный Университет СТАНКИН

