

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ

диссертационной работы Полинской Юлии Геннадьевны

«Квантово-химическое моделирование реакции окисления пропена на кластерах серебра»,
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
(специальности 02.00.04 – физическая химия, 02.00.17 – математическая и квантовая химия)

Работа посвящена квантово-химическому исследованию механизма реакции окисления пропена на кластерах серебра, в том числе биметаллических кластерах, содержащих в своем составе атомы золота. Катализ наноразмерными кластерами металлов является актуальным направлением современной органической химии, имеющим как фундаментальное, так и прикладное значение. Оксид пропилен, механизм образования которого подробно изучается в работе, имеет важное значение и как конечный продукт органического синтеза и как полупродукт для получения широкого спектра других материалов: растворителей, полимеров и пр.

В работе получены новые результаты о молекулярной и электронной структуре кластеров серебра и биметаллических кластеров, содержащих в своем составе атомы серебра и золота. Методами квантовой химии детально охарактеризован механизм окисления пропена на данных кластерах и впервые показано влияние строения кластеров на основные стадии этого процесса. Ряд теоретических результатов получил экспериментальные подтверждения, свидетельствующие о достоверности выводов, сделанных в работе. Полученные автором результаты являются основой для рациональной разработки каталитических систем для процесса окисления пропена на основе кластеров металлов.

Результаты исследований, полученные в работе, опубликованы в 4 статьях в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК РФ, и апробированы на 7 международных конференциях.

По содержанию автореферата можно сделать следующие замечания:

1. При обсуждении достоверности теоретических результатов и корректности выбранного квантово-химического приближения отмечается хорошее согласие результатов расчета параметров двухатомных молекул с экспериментальными данными. Однако двухатомные молекулы не могут служить моделями кластеров, изучаемых в работе, в том числе за счет существенно большей степени металличности кластеров. На стр. 12 автореферата автор демонстрирует хорошее согласие с экспериментом параметров 8-ми и 20-ти атомных кластеров, но почему-то не приводит эти данные в разделе «Достоверность научных результатов».

2. В списке положений, выносимых на защиту, и в качестве вывода приводится тезис о преимущественном протекании реакции на ребре кластеров, в частности, Ag_{20} . Однако на странице 17 автореферата отмечается, что «образование оксидных комплексов на атомах ребер и вершин будет проходить медленно». Если образование оксидных комплексов рассматривается как первая стадия процесса окисления пропена, то было бы уместным более ясно отразить в автореферате логическое согласование между этими двумя утверждениями.

3. На странице 12 автореферата утверждается, что «с увеличением количества атомов золота в кластере, энергия связи уменьшается», тогда как из таблицы 1 следует, что значения энергии связи увеличиваются.

Несмотря на приведенные замечания, диссертационная работа Полинской Ю.Г. полностью отвечает требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, и соответствует всем требованиям п. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. №842. Соискатель, Полинская Юлия Геннадьевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальностям 02.00.04 – физическая химия и 02.00.17 – математическая и квантовая химия.

научный сотрудник,
кандидат химических наук
(02.00.08 – химия элементоорганических соединений)

 Гордеев Евгений Георгиевич

Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки
Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН
Адрес: 119991, г. Москва, Ленинский проспект, 47
Тел.: +7(499)137-29-44
e-mail: gordeev_e@ioc.ac.ru

08.11.2016 г.

Подпись К.Х. Гордеев Е.Г. Заверено
Ученый секретарь
К.Х.Н. Ч.К. Корсаков

