

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)

Пропиленоксид относится к важнейшим полупродуктам для многих промышленно важных процессов. Получение этого продукта в промышленных условиях на серебряных катализаторах привлекает значительное внимание исследователей, однако на текущий момент приемлемые селективности по пропиленоксиду для таких катализаторов не достигнуты. Это ставит перед исследователями вопросы, ответы на которые крайне сложно найти только экспериментальными подходами. В этой связи диссертационная работа Полинской Ю.Г., направленная на углубление представлений о строении активного центра и механизма реакции образования оксида пропилена на серебряных катализаторах, безусловно, является актуальной.

Основными достижениями работы, на наш взгляд, являются: подбор метода расчета строения и физико-химических свойств кластеров серебра, обеспечивающий достаточную точность расчета указанных параметров при сравнительно небольших затратах расчетного времени; выбранные модели кластеров, позволяющие моделировать исследуемый процесс на активных центрах катализаторов различного состава и структуры (в т.ч. для биметаллических); хорошая степень корреляции полученных расчетных результатов с имеющимися экспериментальными; подходы к объяснению и предсказанию селективности катализаторов по целевому продукту.

Вместе с тем по работе можно сделать следующие замечания:

1. Название работы не полностью отражает ее суть, поскольку, помимо кластеров серебра, расчеты проводились и для золотосодержащих систем.
2. На с. 5 говорится, что центры связывания молекулярного кислорода, найденные в работе, подтверждены методом спектроскопии ионного рассеяния. Однако соответствующие экспериментальные данные либо ссылки на имеющиеся публикации в тексте автореферата не приводятся.
3. Из практической значимости работы (с. 5) и вывода 5 (с. 24) неясно, каким образом полученные результаты полезны «при создании катализаторов на основе наночастиц серебра». Ожидается ли увеличение активности и селективности серебряных катализаторов при введении в них небольших количеств золота? Соответственно, с точки зрения автора, какой катализатор предпочтительнее с точки зрения активности и селективности для реакции эпоксидирования пропилена: серебряный или биметаллический Ag-Au?
4. На с. 11 автор указывает, что для кластера $Ag_{16}Au_4$ выбрана модель «ядро-оболочка». При этом в автореферате не приводятся критерии, на основании которых сделан такой выбор, а также подтверждающие результаты расчетов в сопоставлении с другими возможными вариантами структуры $Ag_{16}Au_4$.
5. На с. 11 указано, что проводилась оценка влияния отрицательного заряда на геометрию тетраэдрического кластера Ag_{20}^- , однако соответствующие подтверждения в автореферате не приведены.
6. На с. 20 говорится, что значение изменения энергии для стадии $I_1-TS1-I_2$ составляет 55 кДж/моль, однако на рис. 8 представлены другие данные.
7. В ряде случаев автор использует неудачные формулировки:
 - не ясно, что имеется в виду под «различными по составу кластерами серебра» (с. 3, абзац 2).
 - не ясно, что имеется в виду под установлением влияния структуры и электронного строения кластеров на «ключевые стадии процесса» (с. 4, формулировка цели; с. 5 формулировка практической значимости). О каких параметрах идет речь?
 - на с. 4 фактически говорится о монозамещенных $Ag_{16}Au_4$ кластерах.

Сделанные замечания носят частный характер и не снижают общего впечатления от работы. Считаем, что диссертация Полинской Юлии Геннадьевны, безусловно, отвечает всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к диссертациям на соискание учёной степени кандидата наук, и соответствует всем требованиям п.9-14 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённого 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.

Ведущий научный сотрудник лаборатории каталитических исследований, заведующая кафедрой физической и коллоидной химии, доктор химических наук (02.00.04 – Физическая химия), профессор,
федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет»,
Российская Федерация, 634050, г.Томск, пр. Ленина, 36, (3822)200419, www.tsu.ru,
e-mail: vodyankina_o@mail.ru

Водянкина Ольга Владимировна

Старший научный сотрудник лаборатории каталитических исследований, кандидат химических наук (02.00.04 – Физическая химия),
федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет»,
Российская Федерация, 634050, г.Томск, пр. Ленина, 36, (3822)200419, www.tsu.ru,
e-mail: grigoriyamontov@mail.ru

Мамонтов Григорий Владимирович

Старший научный сотрудник лаборатории каталитических исследований, кандидат химических наук (02.00.04 – Физическая химия),
федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет»,
Российская Федерация, 634050, г.Томск, пр. Ленина, 36, (3822)200419, www.tsu.ru,
e-mail: mik.salaev@gmail.com

Салаев Михаил Анатольевич

22.11.2016

