

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 Пичугиной Д.А. посвящена теоретическому изучению природы активных центров нанесенных золотых катализаторов селективного гидрирования алкинов, изомеризации углеводородов, образования H_2O_2 , а также механизму указанных процессов. Актуальность работы, в частности определяется важностью и эффективностью данных систем для очистки олефиновой фракции от примесей ацетилена в крупнотоннажных промышленных процессах синтеза полимеров.

В работе с помощью современных квантово-химических методов изучена структура предполагаемых активных кластеров золота. Предложены механизмы активации водорода, кислорода, углеводородов, органических тиолов, определены физико-химические параметры для этого взаимодействия. Особый интерес представляют результаты, полученные при моделировании носителя на строения активного центра, так как описание подобных взаимодействий методами квантовой химии представляет сложную задачу. Отдельное внимание заслуживает сравнительный анализ энергий активации гидрирования ацетилена на кластере золота при различной координации углеводорода в адсорбированном комплексе. Выявленные закономерности позволили автору разработать теоретическую модель активного центра катализаторов на основе наночастиц золота для изучаемых процессов и сформулировать рекомендации для направленного регулирования и оптимизации свойств полученных катализаторов.

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

В качестве замечаний можно отметить следующее:

В работе рассматриваются только кластеры, имеющие заряд 0 и ± 1 , тогда как ионы Au^{3+} не рассматриваются. В восстановительной среде изучаемого процесса появление таких ионов, однако, они могут оставаться после синтеза катализатора из-за сильного взаимодействия с носителем.

Данное замечание не снижает научной и практической ценности работы.

Полнота проведенного исследования, научная новизна и апробация результатов 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 ученой степени доктора химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, а ее автор Пичугина Дарья Александровна достойна присуждения степени доктора химических наук.

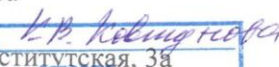

Дата: 25 мая 2016 года

Старший научный сотрудник лаборатории магнитно-резонансной микротомографии ФГБУН Институт «Международный томографический центр» СО РАН, кандидат химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия


Ковтунов Кирилл Викторович

Тел.: +7(383)330-79-26; kovtunov@tomo.nsc.ru



Подпись 
заведующий
Ученый секретарь МТЦ СО РАН

д.х.н. Г.В. Романенко
25.05.2016