

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации «Квантово-химическое моделирование реакции окисления пропилена на кластерах серебра», представленной Полинской Юлией Геннадьевной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальностям 02.00.04 – физическая химия, 02.00.17 – математическая и квантовая химия.

Работа посвящена актуальной теме исследованию реакции окисления пропилена молекулярным кислородом в присутствии кластеров серебра с использованием квантово-химического моделирования. Основной катализатор процесса получения оксида пропилена является серебро, активность которого можно увеличить путем изменения морфологии, размера и формы частиц, вводя другой металл. В работе проведено квантово-химическое моделирование реакции окисления пропилена молекулярным кислородом в присутствии кластеров серебра, модифицированных золотом, установлении влияния структуры и электронного строения кластеров на ключевые стадии процесса.

В работе получены важные научные результаты. С использованием методов квантовой химии установлено строение и рассчитаны физико-химические свойства кластеров Ag_n ($n=8, 20$), замещенных атомами золота. Проведено моделирование синглетного и триплетного путей диссоциации кислорода, установлено влияние электронного и геометрического строения кластеров на энергию активации диссоциации кислорода. Установлен механизм образования оксида пропилена и аллильного радикала а также определена структура активного центра кластеров серебра. Полученные результаты важны для развития основ квантовой и физической химии, так как позволит оценить влияние геометрических факторов и электронного строения кластеров серебра на ключевые стадии процесса. Однако остается до конца не выясненной возможность образования дефектов в структуре кластера при встраивании золота в решетку серебра; каким образом формирование дефектов может отразиться на процессах адсорбции.

Считаю, что диссертационная работа Полинской Ю.Г. является законченным научным исследованием, выполненным на современном научном уровне. Выполнено важное и полезное исследование. По актуальности, научной и практической значимости и сформулированным выводам соответствует уровню требований, предъявляемых к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальностям 02.00.04 – физическая химия, 02.00.17 – математическая и квантовая химия, а ее автор Полинская Ю.Г. по уровню знаний заслуживает присуждения искомой степени.

Курзина Ирина Александровна,

доктор физико – математических наук, доцент,

профессор кафедры Физической и коллоидной химии Химического факультета

Научно исследовательского Томского государственного университета

634055, Россия, Томск, пр. Ленина, 36

e – mail: kurzina99@mail.ru

тел.: 8-913-882-1028

Подпись Курзиной И.А. удостоверяю,

Ученый секретарь ТГУ



Сазонтова Н.А.