

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Беляева Сергея Николаевича «Структура и свойства субнаноразмерных кластеров магния и их реакционная способность в синтезе реактива Гриньара», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности: 02.00.04 – «Физическая химия» (химические науки)

Установление взаимосвязей между структурой и адсорбционно-катализитическими свойствами материалов является важнейшим направлением современных фундаментальных и прикладных исследований в области катализа. Без таких знаний невозможно прогнозирование и создание новых высокоэффективных катализаторов. Направленный дизайн каталитических систем является ключевой проблемой катализа. Высокодисперсные каталитические системы привлекают внимание исследователей как с точки зрения решения фундаментальных проблем катализа, так и с практической точки зрения. Понятно, что размер и структура наноразмерных частиц и металлических кластеров являются основными факторами, определяющими их каталитические свойства. Методы квантовой химии оказываются чрезвычайно полезными для выяснения особенностей строения и свойств малых кластеров. Однако расчеты из первых принципов металлических структур с участием большого количества атомов являются весьма трудоемкими и требуют значительных вычислительных ресурсов и соответствующих программных комплексов. Как правило, такие расчеты проводятся в рамках т.н. периодических моделей и не позволяют рассчитывать частоты колебаний многоатомных кластеров. На примере кластеров магния автором работы разработан подход, позволяющий проводить глобальную и локальную оптимизацию достаточно больших металлических структур на основе подобранных предварительно эмпирических потенциалов атомов. Такие многоатомные кластеры наиболее близко моделируют свойства реальных частиц, имеющих практическое значение. Это несомненно является заслугой автора. Весьма интересными и полезными с точки зрения практического катализа представляются полученные в работе данные о роли растворителя в адсорбционных стадиях синтеза реактива Гриньара. Значение результатов представленной работы выходит за рамки конкретного исследования данной реакции и существенно расширяет фундаментальные знания о формировании и функционировании наноразмерных катализаторов. Поэтому **актуальность, новизна, научная и практическая значимость** работы Беляева С.Н. не вызывают сомнений.

Достоверность полученных данных обоснована квалифицированным использованием набора современных расчетных методов и согласием результатов расчетов, выполненных разными методами. Полученные данные достаточно полно обсуждены, а выводы - корректно

сформулированы. Положения, выносимые на защиту, убедительно доказаны. Автореферат полностью отражает суть проведенного исследования. Постановка работы включает весьма логичную последовательность задач, которые успешно решены автором для достижения поставленной цели.

Однако следует отметить некоторые недостатки работы и изложения материала:

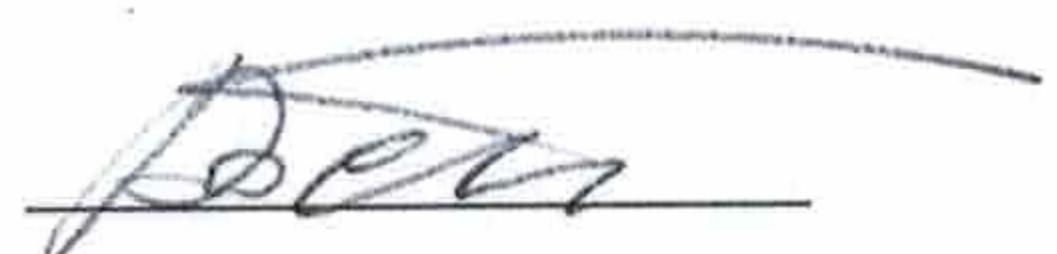
1. В автореферате практически отсутствуют прямые экспериментальные данные, которые следовало бы сопоставить с результатами работы.
2. Авторы обсуждают два возможных пути осуществления реакции Гриньяра – радикальный и молекулярный. Однако в экспериментальных работах по низкотемпературной реакции Гриньяра (Г.Б. Сергеев и др.) обсуждался ион-радикальный механизм процесса. Рассматривал ли автор такую возможность?

Вышесказанные замечания не ставят под сомнение основные научные и практические результаты диссертационной работы. По своей актуальности, научной новизне, объему и практической значимости проведенные исследования соответствуют требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, отраженным в пп. 9-11, 13, 14, «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842 в редакции от 01.10.2018 г., а ее автор - Беляев Сергей Николаевич – заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – «Физическая химия» (химические науки).

Даю согласие на обработку моих персональных данных, связанных с защитой диссертации и оформлением диссертационного дела Беляева С.Н.

Ведущий научный сотрудник кафедры
химической кинетики химического факультета
Федерального государственного бюджетного
образовательного учреждения высшего
образования «Московский государственный
университет имени М.В. Ломоносова»,
доктор химических наук,
доцент

Адрес: 119991, г. Москва,
ГСП-1, Ленинские горы, д. 1,
стр. 3, химический факультет
Тел.: +7 (495) 939-34-98,
E-mail: rtn@kinet.chem.msu.ru
www.chem.msu.ru


Ростовщикова Татьяна
Николаевна

