

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.

Диссертационная работа Беляева С.Н., как это и следует из названия, посвящена анализу на молекулярном уровне особенностей различных механизмов реакций образования реактива Гриньара, протекающих в газовой фазе или в растворах. Из различных теоретических вариантов рассмотрения задач указанного типа в качестве подходящего при исследовании выбран квантово-химический (КХ) метод переходного состояния с расчетами энергетических, термодинамических и др. параметров реакционной системы, который в настоящее время применяется чаще всего и стал, по сути дела, «рабочим» способом изучения подобных задач.

Наш опыт рецензирования таких непростых задач, связанных с изучением реакционной способности систем сложного состава, подсказывает, что объективность оценки заметно возрастает, если в ней участвуют разные специалисты. Это учтено и в данном отзыве, тем более, что рецензенты участвовали (и продолжают участвовать) в совместных работах по сходной тематике с КХ описанием молекулярных механизмов элементарных актов реакций окисления органических субстратов с участием разных окислителей.

Переходя к отзыву, отметим достоинства работы, которые, на наш взгляд, являются бесспорными и определяющими нашу положительную оценку работы в целом.

Работу Беляева А.Н. можно условно разделить на три составные части, каждая из которых значительна по своему объему. В первой из них, имеющей «подготовительный» характер, представлены и достаточно подробно обсуждены результаты многочисленных расчетов кластеров магния разного состава, геометрии и мультиплетности. В двух последующих разделах найдены и также подробно обсуждены конкретные механизмы реакции Гриньара. Сначала это сделано для газообразного случая с целью их применения в качестве эталонных систем для дальнейших сопоставлений с последующим переходом к более реалистической ситуации с учетом среды в виде семи различных адсорбционных растворителей.

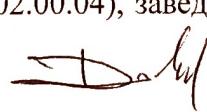
В итоге, получен основной и по нашему мнению обоснованный вывод этой работы о существовании двух параллельных механизмов реакции Гриньара: молекулярном и радикальном.

К сожалению, в автореферате не уточнен, на наш взгляд, вопрос о том, для какого из них получена абсолютно новая информация, опровергающая (а не только дополняющая) известные ранее результаты. В автореферате мы не нашли и очевидного на наш взгляд ответа на вопрос о дальнейшем продолжении изучения этой темы.

Серьезных замечаний ни по выбору темы работы, ни по методике КХ расчетов рассмотренных в ней систем, которые бы повлияли на нашу, несомненно, положительную оценку работы, нет.

Насколько можно судить по автореферату работы Беляева С.Н. полностью отвечает всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в соответствии с Положением о присуждении ученых степеней, утвержденным Правительством Российской Федерации. Подчеркнем соответствие темы обсуждаемой диссертации и полученных в ней результатов химической отрасли наук и специальности 02.00.04 – физическая химия, а также соответствие работы п.9 Положения о присуждении ученых степеней. Полагаем, что Беляев С.Н., безусловно, достоин присвоения ученой степени кандидата химических наук по указанной выше специальности.

Гехман Александр Ефимович,
доктор химических наук (02.00.04), чл.-корр. РАН, заведующий лабораторией металло-
комплексного катализа ИОНХ РАН (8 495 955 48 65). 

Долин Сергей Петрович,
кандидат химических наук (02.00.04), заведующий лабораторией квантовой химии ИОНХ
РАН (8 495 955 48 20). 
dolin@igic.ras.ru

10.06.2021

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки – Институт общей и
неорганической химии им. Н.С.Курнакова Российской академии наук (ИОНХ РАН),
199911 Москва, Ленинский пр-т. д.31 (8 495 952 07 87).

