

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Пасько Павла Александровича
«Особенности стабилизации переходных состояний реакции Принса на пористых
поверхностях», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук
по специальности 02.00.04 – Физическая химия

Селективность реакций, катализируемых цеолитами успешно используется в нефтехимическом синтезе. Катализатор выполняет роль селектора, сужающего спектр образующихся продуктов. В работе Пасько П.А. методами молекулярной динамики исследован каталитический эффект цеолотов, углеродных и борнонитридных нанотрубок в реакции Принса. Работа Пасько П.А. успешно развивает принципы «Shape Selectivity», уточняя особенности моделирования взаимодействия переходных состояний (ПС) с поверхностью твердых тел. В результате был выявлен ряд селективных катализаторов реакции Принса. Количественным критерием являлась энергия адсорбций, величину которой находили и использованием пакета Accelrys Material Studio 5.5. На большом числе цеолитов, углеродных и борнонитридных нанотрубок с диаметром полостей 4 – 20 Å показано, что зависимости энергии стабилизации ПС образования 1,3-диоксанов и гидрированных пиранов от диаметра полости имеют экстремальный характер. Работа Пасько П.А. актуальна, выполнена на высоком методическом уровне. Это обеспечило достоверность полученных результатов. Очевидна новизна работы, ее научная и практическая значимость. Работа Пасько П.А. хорошо апробирована – 4 статьи включены в базу данных Web of Science, 8 докладов на конференциях. В совместных публикациях все расчеты выполнены П.А. Пасько.

Замечание: В тексте автореферата разные обозначения энергии активации E и E_a .

По критериям актуальности темы, научной новизны, объема и практической значимости полученных результатов диссертационная работа удовлетворяет требованиям ВАК установленным п.9 «Положение о порядке присуждения ученых званий» Правительством РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор – П.А. Пасько заслуживает присуждения степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Денисова Таиса Григорьевна
Доктор химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия
Доцент по кафедре физической химии и физической кинетики
Старший научный сотрудник лаборатории радикальных жидкофазных реакций
ФГБУН Институт проблем химической физики РАН

13 января 2020 г.

Подпись Денисовой Таисы Григорьевны заверяю.

Тел. 8 496 522 1082; 8 916 640 46 52

Email: denisova@icp.ac.ru,

142432, г. Черноголовка Московской обл., проспект акад. Семенова Н.Н., д. 1.



Имен. канцелярии
Салобашев А.В.