

ОТЗЫВ

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

Актуальность диссертации П.А. Пасько определяется высокой промышленной значимостью реакции Принса, крайней важностью предсказания избирательной каталитической активности пористых материалов, в том числе в названной реакции, и перспективностью применения с этой целью концепции Transition State Shape Selectivity – селективности переходных состояний по форме.

Диссертационная работа П.А. Пасько посвящена исследованию с помощью методов молекулярной динамики каталитического эффекта ряда цеолитов, углеродных и борнитридных нанотрубок в реакции Принса, а также особенностей стабилизации переходных состояний в присутствии названных катализаторов.

Перечислим некоторые научные результаты автора, представляющие **обширные массивы данных** и отличающиеся **ярко выраженной научной новизной**.

В ряду рассмотренных цеолитов и нанотрубок с диаметром полостей от 4 до 20 Å зависимости энергии стабилизации переходного состояния в полости от её диаметра носят экстремальный характер.

Наибольшее снижение энергии активации наблюдается при определённом оптимальном диаметре поры, близком к размерам переходного состояния.

Соотнесение размеров переходных состояний и пор позволило П.А. Пасько обосновать возможность селективного снижения энергии активации реакции образования алкилзамещённых 1,3-диоксанов из олигомеров формальдегида и алкенов в присутствии цеолитов, углеродных и борнитридных нанотрубок.

Для цеолитов с полостями, имеющими диаметр меньше оптимального, предсказано существование альтернативного, менее эффективного активного центра, локализованного на поверхности и стабилизирующего переходное состояние за счёт избирательного взаимодействия с его полярной частью.

Регулярные кластеры углеродных нанотрубок обладают существенно более высокой каталитической активностью по сравнению с индивидуальными нанотрубками за счёт электронодонорного эффекта со стороны соседних нанотрубок.

Интересно, что регулярные кластеры сохраняют высокую каталитическую активность даже при существенном отличии диаметра нанотрубок от оптимального.

Достоверность полученных П.А. Пасько научных результатов подтверждается их **непротиворечивостью**, использованием **современных методов исследования и передовой расчётной методологии**, **согласием полученных результатов** с данными литературы.

Результаты диссертации имеют **высокую научную и практическую ценность**, **вносят значительный вклад в развитие представлений о механизмах гетерогенно-каталитических реакций и в совершенствование методологии их теоретического исследования**.

Полученные П.А. Пасько результаты являются **основой** алгоритма сканирования поверхности твёрдых веществ с наноразмерными полостями для оценки их каталитической активности. Названный алгоритм уже использован автором для дизайна ряда селективных гетерогенных катализаторов реакции Принса.

Представляя собой **завершённое** на определённом этапе исследование, диссертационная работа П.А. Пасько имеет **широкие перспективы развития**.

В ходе выполнения диссертационной работы П.А. Пасько обнаружил **владение современными методами квантовой химии и молекулярной динамики, различными квантовохимическими подходами** (локализация переходных состояний, вычисление энергии адсорбции и активации в полости и др.). Также диссертант проявил **умение грамотно использовать** в работе ключевые положения органической и супрамолекулярной химии, гетерогенного катализа, химической термодинамики и кинетики, теории строения молекул и вещества, квантовой химии, молекулярной динамики. Это подтверждает **высокую квалификацию и широкий научный кругозор** автора.

Диссертация прошла **хорошую апробацию**, результаты доложены и обсуждены на представительных международных и всероссийских конференциях и школах.

Результаты работы **достаточно полно** отражены в публикациях, среди которых – статьи в ведущих профильных журналах (*Кинетика и катализ*, *Microporous and Mesoporous Materials*) и авторитетных широкопрофильных *Бутлеровских сообщениях* и *Вестнике Башкирского университета*.

Всё сказанное, наряду с грантовой поддержкой, свидетельствует о **высоком научном уровне** диссертационного исследования.

Диссертация П.А. Пасько является научно-квалификационной работой и **соответствует критериям**, установленным пунктами 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении учёных степеней» (утверждено постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842),

предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата наук, а её автор **заслуживает** присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Фамилия, имя, отчество: Федотова Ольга Васильевна

Учёная степень: доктор химических наук (02.00.03 – Органическая химия)

Учёное звание: профессор

Место работы: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»

Должность: директор Института химии, заведующий кафедрой органической и биоорганической химии

Сайт организации: <http://www.sgu.ru>

Электронная почта: fedotova_ov@rambler.ru

Почтовый адрес: 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83, корп. 1,

Институт химии СГУ

Телефон: +7 (8452) 51-69-60

О.В. Федотова

Фамилия, имя, отчество: Панкратов Алексей Николаевич

Учёная степень: доктор химических наук (02.00.04 – Физическая химия)

Учёное звание: профессор

Место работы: федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»

Должность: профессор кафедры аналитической химии и химической экологии

Сайт организации: <http://www.sgu.ru>

Электронная почта: PankratovAN@info.sgu.ru

Почтовый адрес: 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83, корп. 1,

Институт химии СГУ

Телефон: +7 (8452) 51-64-11



А.Н. Панкратов