

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

Диссертационная работа Пасько Павла Александровича «Особенности стабилизации переходных состояний реакции Принса на пористых поверхностях» посвящена актуальной проблеме направленного поиска селективных катализаторов для реакции Принса.

Результаты представляют теоретический и практический интерес в области гетерогенного катализа органических реакций, моделирования процессов адсорбции переходных состояний на поверхностях, содержащих полости наноразмеров.

В работе Пасько П.А. впервые предложен алгоритм сканирования поверхностей пористых веществ, таких как цеолиты, углеродные и борнитридные нанотрубки. На предмет установления их каталитической активности. В данном алгоритме в качестве структурного зонда используется замороженная структура переходного состояния, взаимодействие которого с пористой поверхностью катализатора моделируется методами молекулярной динамики. Количественной мерой оценки данных взаимодействий является энергия адсорбции и её зависимость от диаметра полостей.

С помощью применения данного подхода на достаточно широком круге объектов было показано, что энергия адсорбции переходных состояний экстремальным образом зависит от формы и размеров пор в катализаторе, что и позволяет с помощью теоретических расчетов определить максимально эффективный катализатор для заданной реакции.

Диссертационное исследование Пасько П.А. соответствует паспорту специальности 02.00.04 – физическая химия.

Работа выполнена на высоком научно-теоретическом уровне, по критериям актуальности темы, научной новизны, объему 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 её автор – П.А. Пасько заслуживает присуждения степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

26 декабря 2019.

Научный сотрудник лаборатории Казаченко Александр Сергеевич каталитической химии угля и биомассы Института химии и химической технологии Сибирского отделения Российской академии наук (ИХХТ СО РАН) - обособленного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук» (ФИЦ КНЦ СО РАН).
Кандидат химических наук (02.00.04 – физическая химия)

660036, Россия г. Красноярск, Академгородок, д. 50.
стр. 24 Тел. +7(391)2051950; e-mail:
leo_lion_leo@mail.ru

Подпись н.с., к.х.н., Казаченко Александра Сергеевича заверяю:

Врио учёного секретаря ИХХТ СО РАН



Зайцева Ю.Н.