

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 посвящена моделированию методами молекулярной динамики переходных состояний алкилзамещенных 1,3-диоксанов и гидрированных пиранов, образующихся на катализаторе результате реакции Принса, и установлению зависимостей между энергией стабилизации таких переходных состояний и строением и размером пор различных катализаторов (цеолитов, углеродных и борнитридных нанотрубок). По результатам исследования автором показано, что наибольшее снижение энергии активации реакции Принса достигается при определенном размере пор катализатора, который должен быть сопоставим с размером переходного состояния. При этом изменение размера пор и типа катализатора приводит к существенному изменению селективности реакции Принса, что несомненно, свидетельствует о практической значимости работы. Также автором показано, что в цеолитах с диаметром пор меньше оптимального возможно существование дополнительного менее эффективного активного центра, расположенного на поверхности цеолита и стабилизирующего переходное состояние за счет взаимодействия с его полярным фрагментом. Результаты работы опубликованы в 12 источниках, включая 4 статьи в журналах из перечня ВАК, что свидетельствует об актуальности и научной ценности полученных результатов.

По автореферату имеются следующие вопросы и замечания:

1. Из текста автореферата не совсем понятны критерии отбора геометрии переходных состояний, рассчитанных в работе. Почему для моделирования были выбраны именно такие переходные состояния?
2. В работе утверждается, что количественным критерием, определяющим степень соответствия по размерам и форме переходного состояния и наноразмерной полости в катализаторах, является энергия адсорбции. Однако далее этот параметр нигде не фигури-

рует, но используется величина энергии стабилизации переходного состояния. Как между собой согласуются эти два параметра?

3. Также не совсем понятна методика расчета энергии стабилизации переходного состояния. В чем она заключается и какова точность определения энергии переходного состояния?

Сделанные замечания не умаляют в целом положительной оценки автореферата. По критериям актуальности темы, научной новизны, объему и практической значимости полученных результатов диссертационная работа Пасько Павла Александровича удовлетворяет требованиям пп.9 – 11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 года, предъявляемого к кандидатским диссертациям, а ее автор **заслуживает** присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Пожаров Михаил Владимирович
к.х.н. (02.00.04 – физическая химия)
Доцент кафедры общей и неорганической химии
Института химии ФГБОУ ВО «Саратовский
национальный исследовательский государственный
университет имени Н.Г. Чернышевского»

13.01.2020



410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83
Телефон: (8452) 51-69-60
e-mail: pozharovmv@gmail.com