

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации ПАПУЛОВСКОГО Евгения Сергеевича ⁹³Nb ЯМР кристаллография как метод исследования строения Nb-центров в оксидных Nb-катализаторах представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 — физическая химия и 02.00.15 — кинетика и катализ

Целенаправленный синтез катализаторов с заданными свойствами возможен только при знании на молекулярном уровне строения активных центров. ЯМР спектроскопия позволяет получить уникальную информацию о локальном окружении ядер. Для ЯМР ниобия серьёзной проблемой является большая квадрупольная константа и большая величина анизотропии химического сдвига ядра ⁹³Nb, которые доминируют в спектрах и, как правило, не позволяют точно определить все ЯМР - параметры. Решение этой проблемы возможно на основе сочетания современных экспериментальных методов ЯМР спектроскопии в твердом теле и квантово химических расчетов параметров спектров ЯМР.

В этой связи тема диссертационной работы Папуловского Е.С., целью которой является определение возможностей методики Gauge-Including Projector-Augmented Waves X (GIPAW) для определения ЯМР параметров ядра ⁹³Nb в твёрдом теле и последующего исследования строения нанесённых ниобий-алюминиевых катализаторов комбинацией экспериментальных и теоретических методов твёрдотельной ⁹³Nb ЯМР-спектроскопии, безусловно, **актуальна**.

Автором получен ряд **новых** результатов: Впервые, была исследована предсказательная способность метода GIPAW применительно к ядру ⁹³Nb. Известные экспериментальные корреляции были расширены на основании рассчитанных параметров ЯМР для индивидуальных соединений ниобия. Были определены параметры ЯМР для соединений, которые могут формироваться на поверхности катализаторов или же сами являются катализаторами. Используя экспериментальные методы ЯМР, было исследовано влияние начального этапа приготовления образца на строение поверхностных ниобиевых центров. Рассчитаны ЯМР-параметры AlNbO₄— фазы, которая может присутствовать в катализаторе и, на основании этих расчетов, данная фаза была обнаружена в катализаторе экспериментально. Проведено теоретическое моделирование

строения ниобиевых центров на поверхности оксида алюминия, рассчитаны их параметры ЯМР.

Практическое значение работы Папуловского Е.С. заключается в расширении и углублении представлений об использовании квантовохимических методов расчета для исследования строения оксидных ниобиевых систем экспериментальными методами ^{93}Nb ЯМР в твёрдом теле.

Диссертационная работа Папуловского Е.С. представляет собой законченное исследование в котором предложен новый способ применения квантовохимических методов для анализа экспериментальных данных ^{93}Nb ЯМР.

Автореферат соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор **Папуловский Евгений Сергеевич** заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 — физическая химия и 02.00.15 — кинетика и катализ

Доктор физ.-мат. наук по специальности
05.17.18 - Мембраны и мембранная технология"
Профессор по специальности
02.00.04 - физическая химия
Заведующий лабораторией ЯМР ИПХФ РАН

В.И.Волков

142432, г.Черноголовка, пр-т Ак. Н.Н.Семенова.1
Тел: 8-(49652) 2-80-37
E mail: vitwolf@mail.ru