

ОТЗЫВ

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

В автореферате диссертации Е.С. Папуловского представлены результаты исследования строения Nb-центров в оксидных Nb-катализаторах, которые представляют большой интерес для переработки биомассы, алкилирования ароматических углеводородов, а также при производстве фенола, кумола и др.. Автор в работе уделил особое внимание развитию кристаллографического подхода, формулируемого в современной литературе как метод ЯМР кристаллографии, который рассматривается в качестве нового метода, направленного на изучение структуры веществ и материалов в случае, когда традиционные методы кристаллографии не могут дать полную информацию. Автор при помощи методов квантовой химии и молекулярной динамики определил структурные особенности нанесённых ниобиевых катализаторов, рассчитал спектральные характеристики квадрупольных ядер и смоделировал формы спектральных линий, в том числе в условиях подвижности атомов. Расчетные данные сопоставил с экспериментальными данными полученными методами ядерного магнитного резонанса на ядрах ниобия. Интересным результатом работы является обнаружение корреляционных зависимостей между структурными особенностями каталитических центров (координация, длины связи и др.) и параметрами ЯМР спектроскопии (химические сдвиги, квадрупольные константы). В целом полученные результаты демонстрируют перспективность метода ⁹³Nb ЯМР кристаллографии для исследования строения Nb-центров в оксидных Nb-катализаторах.

Достоверность полученных результатов обеспечивается современным оборудованием, комплексным подходом к интерпретации полученных результатов, предварительной апробацией методов на известных системах. Полученные теоретические результаты находятся в согласии с экспериментальными данными.

Новизна полученных результатов подтверждается тем, что все основные результаты были опубликованы в рецензируемых международных журналах, издаваемых как за рубежом, так и в Российской Федерации.

К представленному автореферату имеется вопрос:

- Стр. 23. Написано: «..также прослеживается корреляция между анизотропией и асимметрией тензора химического сдвига ⁹³Nb для рассчитанных частиц». По определению:

корреляция - это есть взаимосвязь двух (или более) случайных (независимо измеренных) величин, и изменения значений одной (или нескольких) из этих величин приводит к систематическому изменению значений другой величины (или других величин). Анизотропия химического сдвига и параметр асимметрии тензора химического сдвига – это величины, которые определяются одним и тем же взаимодействием, и одним и тем же окружением резонирующего ядра. Можно ли анизотропию химического сдвига и параметр асимметрии тензора химического сдвига, которые определяются из одного и того же спектра, рассматривать как случайные и независимо измеренные величины?

Указанное замечание/вопрос не влияет на оценку общего уровня квалификации Папуловского Евгения Сергеевича. Считаю, что работа "⁹³Nb ЯМР кристаллография как метод исследования строения Nb-центров в оксидных Nb-катализаторах" отвечает 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.

Козлова Светлана Геннадьевна,

Доктор физико-математических наук,

заведующий лабораторий физической химии конденсированных сред.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

Институт неорганической химии им. ак. А.В. Николаева (ИНХ СО РАН),

630090, Россия, г. Новосибирск, ул. ак. Лаврентьева, д.3, Тел. 8(393)3307531,

Электронная почта: sgk@niic.nsc.ru

Подпись Козловой С.Г. заверяю

Ученый секретарь ИНХ СО РАН

д.х.н.

Я согласна на включение персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку. 10.10.2016 г.