

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Папуловского Евгения Сергеевича « $^{93}\text{Nb}$  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.

Актуальность диссертационной работы Е.С. Папуловского не вызывает сомнения, работа выполнена на стыке двух направлений: экспериментальная ЯМР-спектроскопия в твёрдом теле и квантово-химические расчёты ЯМР параметров. ЯМР кристаллография — официально признанное ЮПАК направление кристаллографии, активно развивающееся в последнее десятилетие в приложении к неупорядоченным дефектным системам, каковыми и являются катализаторы. Выбранные в качестве объекта исследования ниобиевые катализаторы являются важными катализаторами в области кислотного катализа. ЯМР-спектроскопия на ядре ниобия- $^{93}\text{Nb}$  начала активно развиваться лишь в последнее десятилетие, что обусловлено большим спином ядра ( $9/2$ ), значительными величинами квадрупольного взаимодействия и анизотропии химического сдвига. Без квантово-химических расчётов анализ  $^{93}\text{Nb}$  ЯМР спектров в твёрдом теле порой просто не возможен.

Автор данного реферата провёл огромную методическую работу по реализации метода GIPAW, сочетающего достаточную точность с относительно низкими трудозатратами, для исследования оксидных соединений ниобия, были просчитаны  $^{93}\text{Nb}$  ЯМР параметры для более, чем 40 оксидных соединений ниобия, получены интересные корреляции между параметрами ЯМР и характеристиками локального окружения ядра. Далее, опираясь на полученные данные, автор весьма успешно провёл исследование строения нанесённых ниобиевых катализаторов, продемонстрировав, как начальная стадия приготовления образца влияет на строение центров в катализаторе Nb/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

Работа может быть полезна в методическом плане для исследования различных ниобий-содержащих объектов, базовые данные работы вполне могут быть использованы при обучении специалистов в области твердотельной ЯМР-спектроскопии квадрупольных ядер.

Результаты работы опубликованы в российских и международных научных журналах, представлены на российских и международных конференциях.

Диссертационная работа Е.С. Папуловского не имеет существенных недостатков, однако можно отметить, что некоторые положения, выносимые на защиту (особенно первое, третье и пятое), сформулированы неудачно (они не носят дискуссионного характера, то есть не имеют признака «положения»). Частично этот недостаток компенсируется в выводах диссертации.

Автореферат оформлен в соответствии с требованиями ВАК, однако объём его несколько завышен. В автореферате отсутствуют ссылки на публикацию тезисов докладов.

Оценивая работу по содержанию автореферата, можно с уверенностью утверждать, что по объёму выполненного исследования, научной и практической значимости, диссертационная работа Е.С. Папуловского несомненно соответствует квалификационным требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям согласно Положению ВАК о присуждении учёных степеней (утверждённого постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842), а её автор заслуживает присвоения учёной степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 — физическая химия и 02.00.15 — кинетика и катализ.

Профессор по кафедре радиофизики,  
д.ф.-м.-н. по специальностям 01.04.03 – радиофизика  
и 01.04.07 – физика конденсированного состояния,  
профессор кафедры ядерно-физических методов исследования СПбГУ

*Согласен на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку.*

Чижик  
Владимир Иванович

13 октября 2016

Подпись В.И. Чижика заверяю,

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»  
198504 Санкт-Петербург,  
Ульяновская ул., д. 1,  
+7 428 46 43  
v.chizhik@spbu.ru

*Документ подготовлен по личной инициативе*

Текст документа размещен  
в открытом доступе  
на сайте СПбГУ по адресу  
<http://spbu.ru/science/expert.htm>