

## 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

Тема диссертационной работы Е.С. Папуловского относится к области разработки методики целенаправленного синтеза ниобиевых катализаторов, используемых в ряде важных химических процессов. Актуальность выбранной темы не вызывает сомнений, а предложенный подход, сочетающий теоретические методы квантовой химии и экспериментальные методы ядерного магнитного резонанса, является обоснованно выбранным для решения поставленной задачи. В работе в рамках GIPAW подхода проведена серия расчётов параметров ядерного спин-гамильтониана для ряда ниобий-содержащих оксидов, как простых, для выяснения релевантности выбранного метода, так и сложных, важных для катализа.

Следует особо отметить новизну полученных результатов (впервые выполнены систематические исследования в рамках метода GIPAW применительно к ядру  $^{93}\text{Nb}$ ), объём проделанной работы (проведён расчёт более сорока химических соединений) и высокий методологический уровень данного исследования.

Резюмируя, отмечу, что в работе тонкими физическо-химическими методами решена практически важная задача. Предметом исследования был сложный объект — ниобиевый катализатор, нанесённый на поверхность  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Благодаря тому, что был применён комплексный подход, соискателю в этой сложной системе удалось не только определить строение  $\text{NbO}_x$  центров на поверхности  $\text{Al}_2\text{O}_3$  при разных концентрациях ниобия и на разных гранях оксида алюминия, но и установить корреляции параметров спектра  $^{93}\text{Nb}$  ЯМР и координационного числа  $\text{NbO}_x$  центров.

К замечаниям можно отнести следующее. В автореферате никак не прокомментирован тот факт, что все расчёты велись без учёта спин-орбитального взаимодействия, однако для тяжёлых ядер релятивистские эффекты могут внести заметную поправку в величину химического сдвига. И хотя из представленной на Рис. 2 корреляции между вычисленными и экспериментальными параметрами спектра  $^{93}\text{Nb}$  ЯМР для серии ниобиевых соединений можно сделать вывод, что для  $^{93}\text{Nb}$  данный вклад не является существенным, в самом тексте автореферата это не отражено.

Однако данное замечание носит частный характер, не умаляя достоинств работы, и не влияет на общую высокую оценку результатов диссертации.

Результаты диссертации опубликованы в 4 печатных работах в рецензируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК и системы цитирования Scopus и Web of Science, и 9 тезисах докладов в материалах конференций. Автореферат и научные публикации полностью отражают содержание диссертации.

Считаю, что диссертационная работа Е.С. Папуловского выполнена на высоком уровне и представляет завершённое научное исследование. По актуальности избранной темы, объёму исследований, установленным закономерностям, достоверности полученных результатов и их новизне диссертация Е.С. Папуловского «<sup>93</sup>Nb ЯМР кристаллография как метод исследования строения Nb-центров в оксидных Nb-катализаторах» удовлетворяет всем требованиям ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата наук, а её автор, безусловно, заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 — физическая химия и 02.00.15 — кинетика и катализ.

Доцент кафедры ядерно-физических  
методов исследования, доцент по кафедре,  
к.ф.-м.н. — специальность 01.04.03 - радиопизика

Шеляпина  
Марина Германовна

Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Санкт-Петербургский государственный университет»  
Россия, 198504, Санкт-Петербург,  
Петергоф, Ульяновская ул. д.1  
Тел: +7 (952) 381-46-25  
E-mail: [marina.shelyapina@spbu.ru](mailto:marina.shelyapina@spbu.ru)  
«13» октября 2016 г.

Согласна на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета и их дальнейшую обработку