

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Полынского Михаила Вячеславовича «Квантово-химическое исследование палладиевых каталитических систем и эволюции катализаторов в реакциях кросс-сочетания с арилгалогенидами», представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 – физическая химия и 02.00.03 – органическая химия.

Диссертационная работа М.В. Полынского посвящена квантово-химическому моделированию поведения каталитических систем на основе палладия в некоторых органических реакциях. Актуальность, теоретическая и практическая значимость работы не вызывают сомнений. М.В. Полынским проведено более 1500 квантово-химических расчётов с использованием современных квантово-химических методов, на основании которых предложены несколько различных моделей, в том числе модель эволюции каталитической системы в ходе реакции. Использованные расчётные методы являются адекватными для решения поставленных в работе задач, а полученные результаты представляются достоверными. Результаты работы опубликованы в 4 статьях в высокорейтинговых международных журналах, индексируемых в Web of Science/Scopus, одной главе в монографии и представлены в 7 тезисах докладов на 4 международных и 3 российских конференциях.

По тексту автореферата можно сделать следующие замечания:

- 1) В тексте автореферата не уделяется достаточно внимания доказательству применимости использованных автором расчётных методов. Утверждение автора на стр. 7, строки 2-4 автореферата о соответствии расчётных и экспериментальных данных не подкреплено конкретными количественными характеристиками. Из текста автореферата не ясно, что представляет собой тестовая выборка (стр. 9, строка 14 сверху), какие характеристики (и каких соединений) в ней входят.
- 2) Автор довольно вольно обращается с представлением термодинамических характеристик процессов. Так, на многих схемах указаны величины изменения энергии Гиббса (ΔG) реакций, однако температура и концентрации (парциальные давления) участников реакций не указаны. Если автор имел в виду изменение стандартной энергии Гиббса, то следовало указать ΔG°_{298} .
- 3) На рис. 9 приведены «относительные полные энергии» шести соединений, которые не являются изомерами. Не указано соединение, относительно которого приведены значения энергий на рис. 9. Из текста автореферата не ясно, какую характеристику автор использует в качестве меры «относительной стабильности».

- 4) Участие в «переписке с издательствами» (стр. 7, строка 10 снизу) положительно характеризует автора, но не может служить его личным вкладом в представленную диссертационную работу.
- 5) В тексте автореферата встречаются стилистические ошибки и повторы.

По тексту автореферата можно задать следующий вопрос:

На основании предложенных моделей поведения каталитических систем были ли автором сформулированы конкретные рекомендации для оптимизации условий проведения каталитических процессов? Были ли такие рекомендации проверены и подтверждены экспериментально?

Оценивая диссертационную работу М.В. Полынского в целом, следует отметить, что она является законченным исследованием, существенно расширившим представления о механизмах каталитической активности палладий-содержащих катализаторов в органических реакциях.

Представленная диссертационная работа соответствует специальностям 02.00.04 – физическая химия и 02.00.03 – органическая химия, по объему проведенных исследований, их научной новизне и практической значимости безусловно удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утвержденного Постановлением № 842 Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года (с изменениями постановления Правительства Российской Федерации от 21 апреля 2016 г. № 335 «О внесении изменений в Положение о присуждении учёных степеней»), а её автор Михаил Вячеславович Полынский заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 – физическая химия и 02.00.03 – органическая химия.

Отзыв составил: 
Тимошкин Алексей Юрьевич, кандидат химических наук (02.00.01 – неорганическая химия), доцент, профессор с возложением исполнения обязанностей заведующего кафедрой общей и неорганической химии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский Государственный Университет»

199034 г. Санкт-Петербург, Университетская наб. 7/9,
Тел. +7 (812) 428-4071

E-mail: a.y.timoshkin@spbu.ru

14 сентября 2020 г.

ЛИЧНУЮ ПОДПИСЬ
НАЧАЛЬНИК ОТДЕЛА КАДРОВ МЗ
Н. И. МАШТЕПА



ДОКУМЕНТ
ПОДГОТОВЛЕН
ПО ЛИЧНОЙ
ИНИЦИАТИВЕ

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