

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Полинского Михаила Вячеславовича «Квантово-химические исследования палладиевых каталитических систем и эволюции катализаторов в реакциях сочетания с арилгалогенидами», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 – физическая химия, 02.00.03 – органическая химия

Палладий и его соединения (соли, сплавы с другими металлами, интеркалаты и др.) завоевали лидирующие позиции в линейке эффективных катализаторов для многих синтетических процессов органической химии. Среди них наибольший интерес представляют гидродегалогенирование, в том числе восстановительное дехлорирование полихлораренов, относящихся к стойким органическим загрязнителям, и реакции образования углерод-углеродных связей. Диссертационная работа Полинского М.В. посвящена направленному дизайну Pd-катализаторов с позиций квантовой химии для их использования в реакциях образования C-C – связей методами сочетания. Приоритетность данного диссертационного исследования обоснована назревшей необходимостью понимания путей активации и дезактивации Pd-катализаторов в ходе химических процессов для выработки стратегии и тактики реальных взаимодействий. В этой связи диссертационная работа Полинского М.В. является **актуальной и своевременной**.

Цель работы заключается в исследовании динамических превращений каталитических Pd-систем в реакциях сочетания с арилгалогенидами и выявлении факторов, влияющих на их активность и стабильность. На основании поставленной цели Полинским М.В. сформулированы соответствующие адекватные **задачи**, которые необходимо было решить в ходе выполнения настоящего исследования. **Положения, выносимые на защиту**, соответствуют содержанию работы.

Научная новизна представленной работы заключается в следующих достигнутых результатах:

- впервые в одной системе в рамках одного исследования рассмотрены наночастицы и молекулярные формы палладия;
- впервые на основе компьютерного моделирования сформулирована модель образования «коктейля» различных молекулярных частиц палладия под действием арилгалогенидов, фосфиновых лигандов, основания $(\text{CH}_3)_3\text{N}$ и галогенид-ионов;
- впервые рассмотрены природа Pd-соединений, образованных *in situ* в реакции Негиши, выдвинута теоретическая модель автозамедления этой реакции;
- применена новая модель ступенчатой поверхности углерода для оценки сродства Pd(0) к поверхности;
- впервые показана применимость и установлена высокая точность полуэмпирического метода PM6-DH2 для расчета теплоты адсорбции молекул на поверхности графена.

На основании полученных Полинским М.В. результатов стало возможным оценить влияние участвующих в реакциях сочетания реагентов на стабильность и активность Pd-катализаторов, что позволяет спрогнозировать и с высокой долей вероятности эффективно провести реальные эксперименты. Эти достижения определяют **практическую значимость** диссертационной работы.

Достоверность научных положений работы, выводов, рекомендаций и заключений не вызывает сомнений, поскольку в ходе исследования активно использованы современные квантово-химические методы и модели расчета и большая выборка (более 1500) самих расчетов различной вычислительной сложности. По результатам диссертационной работы опубликовано 4 статьи в зарубежных рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ, 1 глава в зарубежной коллективной монографии и 7 тезисов докладов на конференциях различного уровня. Выводы по диссертационной работе соответствуют представленному в автореферате содержанию.

При прочтении текста автореферата появились следующие вопросы:

1. на стр. 6–7 автореферата автор отмечает, что в п.п. 3.1.8. 3.2.6 диссертации «приведены примеры на работы других коллективов, отмечающие согласование выдвинутых моделей и экспериментальных наблюдений». Есть ли в литературе примеры отсутствия согласований выдвинутых моделей?;

2. приведите, пожалуйста, примеры катализаторов, в том числе на основе Pd, для которых поверхностные дефекты подложек оказывали отрицательную роль на протекание химических процессов, подобных реакциям сочетания.

После прочтения автореферата диссертационная работа Полинского М.В. производит общее хорошее впечатление. В целом, диссертационная работа построена логично и обладает внутренним единством. По уровню выполнения исследований научная работа Полинского М.В. достойна самых высоких оценок. Полученные результаты вносят значимый вклад в развитие квантовой химии и каталитических процессов.

Результаты диссертационной работы Полинского М.В. представляют интерес для специалистов в области органической химии и могут быть использованы в таких научных учреждениях как ИОС УрО РАН, УрФУ, ИНЭОС РАН, МГУ, СПбГУ и др.

Таким образом, диссертационная работа Полинского Михаила Вячеславовича «Квантово-химические исследования палладиевых каталитических систем и эволюции катализаторов в реакциях сочетания с арилгалогенидами» является научно-квалификационной работой высокого уровня. Она содержит обоснованную актуальность, научную и практическую значимость, обладает достаточной новизной, а полученные результаты вносят вклад в развитие химической отрасли.

Перечисленная совокупность достоинств диссертационной работы соответствует требованиям п.п. 9–14 «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор – Полинский Михаил Вячеславович – заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 – физическая химия и 02.00.03 – органическая химия.

Салоутин Виктор Иванович,

член-корреспондент РАН,

доктор химических наук, 02.00.08 – Химия элементоорганических соединений,

профессор, 02.00.03 – Органическая химия,

заместитель директора по научной работе

Федерального государственного бюджетного

учреждения науки Института органического

синтеза им. И.Я. Постовского
Уральского отделения
Российской академии наук
(ИОС УрО РАН)



Салоутин В.И.
14.09.2020г.

620108, Россия, г. Екатеринбург,
ул. С. Ковалевской / Академическая, д. 22 / 20.
Тел./факс: + 7 (343) 374-59-54
e-mail: saloutin@ios.uran.ru

Горбунова Татьяна Ивановна,
доктор химических наук, 02.00.03 – Органическая химия,
ведущий научный сотрудник
лаборатории фторорганических соединений
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Института органического
синтеза им. И.Я. Постовского
Уральского отделения
Российской академии наук
(ИОС УрО РАН)



Горбунова Т.И.
14.09.2020г.

620108, Россия, г. Екатеринбург,
ул. С. Ковалевской / Академическая, д. 22 / 20.
Тел./факс: + 7 (343) 369-30-58
e-mail: gorbunova@ios.uran.ru

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
органического синтеза им. И.Я. Постовского Уральского отделения Российской
академии наук (ИОС УрО РАН)
Адрес: 620108, Россия, г. Екатеринбург, ул. С. Ковалевской / Академическая, д. 22 /
20. Тел./факс: + 7 (343) 369-30-58. Адрес сайта: <https://www.ios.uran.ru>.

Подписи Салоутина В.И. и Горбуновой Т.И. заверяю:
Ученый секретарь ИОС УрО РАН, к.т.н.:



Красникова О.В.

Мы, Салоутин Виктор Иванович и Горбунова Татьяна Ивановна, согласны на
включение наших персональных данных в документы, связанные с работой
диссертационного совета Д 002.222.02, и их дальнейшую обработку.

