

ОТЗЫВ

на автореферат Палько Надежды Николаевны «Структура и физико-химические свойства агломератов, включающих атомы переходных металлов», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Диссертационная работа Н.Н. Палько посвящена моделированию структур и исследованию взаимосвязи строения с физико-химическими свойствами «агломератов», включающих переходные металлы (Cu, Ni, Mn, Ti, Ru, Os) и органические лиганды. В настоящее время исследования, посвященные расчетно-теоретическому моделированию разнообразных процессов, веществ и материалов, представляет собой одну из наиболее динамично развивающихся областей исследований. Применение расчетных методик и моделирования во многих случаях позволяет отказаться от проведения трудоемких и дорогостоящих экспериментальных исследований. Сочетание таких исследований с экспериментом позволяет достичь более глубокого понимания причин наблюдаемых в экспериментах явлений. Все это указывает на **актуальность** темы данной работы.

Автореферат содержит результаты теоретических исследований по структурам и спектральным свойствам комплексов 1,2,4,5-тетразина с медью, никелем и марганцем (противоионы – хлорид, ацетат), конформерам осмиевых кластеров с различными лигандами, моделированию наночастиц диоксида титана и адсорбционных комплексов на их основе. Обоснованность сделанных автором выводов и научная ценность работы сомнений не вызывают. Достоверность результатов обеспечивается использованием современных методов компьютерного моделирования и согласованностью результатов с экспериментальными данными. Еще раз отмечу, что стремление автора сравнить результаты своих расчетов с доступными экспериментальными данными, не ограничиваясь изучением «сферического коня в вакууме», вызывает уважение. Основные результаты и выводы, полученные в работе, соответствуют поставленным задачам. Результаты работы опубликованы в серьезных научных журналах и в полной мере отражают содержание и основные выводы диссертации. Практическое значение работы связано с развитием и углублением методов расчетно-теоретического моделирования комплексных соединений и материалов на основе наночастиц.

Принципиальных замечаний по содержанию работы нет. В части стилистики и терминологии к автору имеются претензии, преимущественно это касается раздела «Общая характеристика работы». Например, весь круг

изученных автором соединений никак нельзя назвать общим термином «молекулярные агломераты». Это комплексные соединения, адсорбционные комплексы на основе наночастиц, кластеры. Встречаются крайне неудачные фразы: «В случае нескольких потенциальных центров образования межмолекулярного взаимодействия...», «...площадью доступной для растворителя поверхности кислорода». Только с трудом можно догадаться, что речь идет соответственно о функциональных группах, преимущественно отвечающих за межмолекулярные взаимодействия и о доле поверхности кластера, занятой атомами кислорода. Сделанные замечания не влияют на научную ценность работы.

В целом, диссертация Н.Н. Палько подготовлена на актуальную тему, содержит новые научные и практические результаты, представляет собой законченную научно-квалифицированную работу и полностью отвечает требованиям п. 9 – 14 Положения о присуждении учёных степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г., а её автор, Палько Надежда Николаевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Манаков Андрей Юрьевич

Доктор химических наук, специальность 02.00.04 – физическая химия

Должность: главный научный сотрудник лаборатории клатратных соединений

Организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт неорганической химии им.А.В.Николаева Сибирского отделения Российской академии наук

Почтовый адрес: ИНХ СО РАН, проспект ак. Лаврентьева, 3, Новосибирск, 630090

Тел. +7-383-316-53-46

E-mail: manakov@niic.nsc.ru

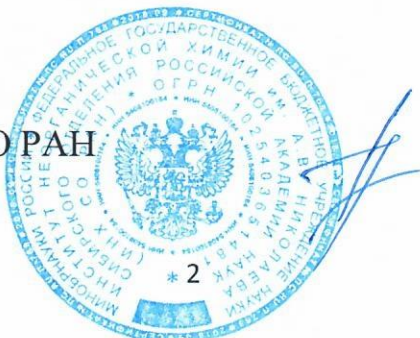
Согласен на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.



Манаков Андрей Юрьевич
«28» ноября 2024 г.

Подпись заверяю:

Ученый секретарь ИНХ СО РАН



О.А. Герасько