

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 структуры широкого класса молекулярных агломератов, включающих различные металлы с органическими лигандами, с целью изучения взаимосвязи строения с физико-химическими свойствами агломератов. Такие агломераты проявляют уникальные физико-химические свойства и имеют большой потенциал для практических приложений. Поэтому они подробно исследуются различными теоретическими и экспериментальными методами, что указывает на актуальность данной работы.

В автореферате приведены результаты теоретических исследований комплексов 1,2,4,5-тетразинов с переходными металлами, строение которых трудно изучать экспериментально. Рассчитаны ИК спектры, установлены структуры комплексов. Также изучены комплексы осмия в различных растворителях, проведен анализ конформационных состояний кластеров и потенциальных кривых внутреннего вращения для различных лигандов в разных растворителях. Для наночастиц диоксида титана исследована их структура и адсорбционные свойства с красителями, аминокислотами, дипептидами, а также фотоэлектрические свойства.

Практическое значение работы в том, что проведенное исследование адсорбционных и фотоэлектрических свойств дает возможность прогнозировать важные физические свойства наночастиц диоксида титана, которые зависят от типа красителя и размера самих частиц. Это может иметь значение, в частности, для эффективного преобразования солнечной энергии. Проведенный конформационный анализ осмиевых кластеров открывает возможность определения стабильных конформеров в разных растворителях, что важно для разделения смеси ротамеров.

Достоверность результатов обеспечивается использованием современных методов компьютерного моделирования и согласованностью результатов с экспериментальными данными. Основные результаты и выводы, полученные в работе, соответствуют поставленным задачам. Публикации автора в полной мере отражают содержание и основные выводы диссертации.

Диссертация Н.Н. Палько относится к актуальной теме, содержит новые научные и практические результаты, представляет собой законченную научно-

квалифицированную работу, 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.

д.ф.-м.н.
28.11.2024



Медведев Николай Николаевич

Заведующий лабораторией «Молекулярной динамики и структуры»
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского
Сибирского отделения Российской академии наук
Адрес: 630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, 3

Тел: (383) 3332854
E-mail: nikmed@kinetics.nsc.ru

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

Подпись Медведева Н.Н. удостоверяю



Ученый секретарь
ИХКГ СО РАН
к.ф.-м.н.
Пыряева А.П.