ОТЗЫВ

на автореферат кандидатской диссертации Лацинской Зои Николаевны на тему «Исследование механизмов превращения C_2-C_4 алкенов на цеолитах, модифицированных Zn, Cu, Ag, методами ЯМР и ИК-спектроскопии» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности -1.4.4. Физическая химия

Данная диссертационная работа направлена на решение ряда актуальных задач, связанных с изучением алкенов, которые представляют интерес как одни из основных промежуточных продуктов нефтехимии, потребление которых неуклонно растет. Перспективными катализаторами важных процессов ароматизации и олигомеризации легких алкенов являются металлсодержащие цеолиты, например, Me-ZSM-5 (Me=Cu, Zn, Ag и др.). Для разработки эффективных катализаторов необходимо глубокое понимание механизмов превращения легких алкенов, протекающих на цеолитах различных типов. Таким образом, научная значимость диссертационного исследования состоит в выявлении и исследовании закономерностей механизмов превращения C_2-C_4 алкенов на цеолитах BEA и ZSM-5, модифицированных Zn, Cu, Ag.

Среди основных результатов, представленных в автореферате, следует отметить, что автором были изучены особенности механизмов превращений легких алкенов на цеолитах Cu-ZSM-5, Ag-ZSM-5, Zn-BEA и Zn-ZSM-5. Установлено, что интермедиатами олигомеризации и ароматизации алкенов являются π -комплексы алкенов с металлсодержащими катионными центрами. Показано, что Zn-ZSM-5 является эффективным для осуществления процесса селективной димеризации этилена в бутен-2. На основе квантово-химического моделирования определен наиболее энергетически выгодный реакционный путь, для которого характерно раскрытие связей $C=C$ в двух молекулах этилена с образованием мостиковых димерных частиц $Zn-(CH_2)_4-O$. Показано, что Cu-ZSM-5 способствует процессу превращения пропилена путем окисления в акролеин или ароматизации в толуол при температурах от 573К до 673К или больше 673К, соответственно.

К преимуществам работы можно отнести использование автором комплекса методов, таких как спектроскопия ЯМР высокого разрешения в твердом теле с вращением образца под магическим углом, ИК-Фурье спектроскопия, а также квантово-химические расчеты в рамках теории функционала плотности, что позволяет более глубоко изучить рассматриваемые в работе процессы.

Однако по автореферату имеются следующие замечания: не хватает какого-либо освещения деталей квантово-химических расчетов, приведены лишь некоторые результаты, полученные в ходе их выполнения. Понятно, что информация представлена в основном тексте диссертационной работы, но для общего понимания полученных результатов эти данные являются необходимыми. Кроме того, автореферат не лишен ряда опечаток и стилистических ошибок, не влияющих на восприятие изложенного материала.

Оценивая в целом представленные в автореферате результаты, положения и выводы, а также принимая во внимания опубликованные работы, можно утверждать, что диссертационное исследование выполнено на высоком научном уровне, является актуальным и практически ценным для новых разработок в области создания высокоэффективных катализаторов. Диссертационная работа полностью соответствует требованиям ВАК Российской Федерации, а Лащинская Зоя Николаевна присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности -1.4.4. Физическая химия.

Доцент кафедры теоретической и вычислительной физики физического факультета Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Южный федеральный университет»,

к.ф.-м.н., доцент

Сухарина Галина Борисовна