

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Колоколова Даниила Викторовича « ^2H спектроскопия в исследовании молекулярной подвижности в микропористых материалах: цеолитах и металл-органических каркасах», представленной на соискание учёной степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Тема диссертационной работы Д.В. Колоколова относится к области развития методов ^2H ЯМР спектроскопии для изучения молекулярной подвижности в микропористых материалах, а именно, цеолитах и металл-органических каркасах. Актуальность выбранной темы не вызывает сомнений: исследование подвижности молекул в условиях конфайнмента, размеры которого сопоставимы с размером адсорбированных молекул, является важным для понимания процессов сорбции, каталитических реакций и др. Предложенный автором подход, основанный на применении методов ^2H ЯМР, является важным дополнением к более часто используемым ^{13}C и ^1H ЯМР исследованиям.

Следует особо отметить широкий спектр поставленных задач исследования, новизну полученных результатов, высокий методологический уровень данной работы и её практическую значимость, в частности, возможности ^2H ЯМР спектроскопии адсорбированных молекул пиридина для характеристики кислотных центров на поверхности цеолита.

Результаты диссертации опубликованы в 30 статьях в ведущих международных научных журналах, входящих в перечень ВАК и системы цитирования Scopus и Web of Science, и в более чем 30 тезисах докладов в материалах научных конференций. Автореферат и научные публикации полностью отражают содержание диссертации.

Тем не менее в ходе прочтения автореферата возник ряд вопросов и замечаний, которые приведены ниже.

- 1) В Главе 2 автор приводит результаты исследования динамики алканов в цеолите 5А, отмечая сложную динамику адсорбированных молекул в условиях наноконфайнмента. Каковы значения энергии активации вращательного и трансляционного движения молекул? Как они меняются с ростом длины цепи? Также было бы интересно сравнить полученные результаты для данного цеолита с другими цеолитами, с большим диаметром каналов и иной топологией каркаса.
- 2) Там же автор говорит об «эффекте окна» в цеолите 5А, т.е. об увеличении скорости диффузии при росте длины углеводородной цепи. Насколько существенны эти изменения?
- 3) При описании результатов исследования подвижности этилена в каркасе цеолита Ag/H-ZSM-5 автор приводит величины энергий активации и скоростей вращения для различных типов вращения. При этом оценка скорости вращения вокруг оси C_2' , ортогональной плоскости молекулы, составляет 10-400 кГц, т.е. разброс более чем на порядок. Чем объясняется такой разброс, при том, что энергия активации приводится с точностью до десятых кДж/моль? И для какой температуры приведены скорости вращения?

- 4) В своих исследованиях автор в основном использовал метод ^2H ЯМР и КУРН, однако в автореферате не приводятся сравнения с данными ^1H и ^{13}C ЯМР, которые, как отмечает автор во введении, являются комплиментарными к ^2H ЯМР. Кроме того, динамика протонированных и дейтерированных молекул должна быть различна. Проводились ли подобные сравнения в рамках данной работы или с литературными данными?

Однако приведенные выше вопросы и замечания ни коим образом не умаляют высокую оценку работы, а обусловлены скорее большим к ней интересом. Считаю, что диссертационная работа Д.В. Колоколова выполнена на высоком уровне и представляет завершённое научное исследование. По актуальности избранной темы, объёму исследований, установленным закономерностям, достоверности полученных результатов, их новизне и практической значимости диссертация Д.В. Колоколова « ^2H спектроскопия в исследовании молекулярной подвижности в микропористых материалах: цеолитах и металл-органических каркасах» полностью удовлетворяет всем требованиям ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени доктора наук, а её автор, безусловно, заслуживает присуждения учёной степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Доктор физико-математических наук
по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного
состояния, профессор Кафедры ядерно-физических
методов исследования Санкт-Петербургского
государственного университета

Шеляпина Марина Германовна

Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего образования
«Санкт-Петербургский государственный университет»
Россия, 198504, Санкт-Петербург,
Петергоф, Ульяновская ул. д.1

Тел: +

E-mail

«30» сентября 2024 г.

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