

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Колоколова Даниила Игоревича
«²H ЯМР СПЕКТРОСКОПИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ПОДВИЖНОСТИ В МИКРОПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛАХ:
ЦЕОЛИТАХ И МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСАХ»,
представленной на соискание ученой степени доктора химических наук
по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Исследование строения и молекулярной подвижности микропористых материалов и их взаимодействия с гостевыми молекулами является одной из важнейших фундаментальных задач физической химии. Металл-органические каркасы (МОК) и молекулярные сита – цеолиты используются для проведения каталитических процессов, разделения газовых смесей, упорядочения миграции зарядов в электролитах и т.п., что говорит об актуальности и практической важности темы диссертационного исследования.

Используемый в исследовании ЯМР на ядрах дейтерия является прямым методом изучения вращательного движения молекул как целого и их фрагментов, поскольку резонансная частота переходов ЯМР определяется квадрупольным взаимодействием дейтрона и зависит от ориентации связи C-D по отношению к магнитному полю спектрометра. Изменение этой ориентации из-за движения молекулы приводит к изменению формы спектра и релаксации спина ядра. Трансформации спектров и их релаксационных характеристик можно рассчитывать, используя различные модели движения, с дальнейшим выбором модели, адекватной экспериментальным данным. Параметры квадрупольного взаимодействия ядра дейтерия таковы, что позволяют изучать молекулярные движения в широком диапазоне времён корреляции от пико- до миллисекунд. Обсуждаемая работа является оригинальным и успешным обобщающим исследованием нескольких важных с практической точки зрения МОК и цеолитов, и их взаимодействия гостевыми органическими молекулами.

По автореферату у нас есть два замечания. 1) На стр. 9-10 приведён список из 16 задач, решаемых в работе, а на стр. 14 перечислены 8 положений, вынесенных на защиту. Нам представляется целесообразным обобщить постановку задач и уменьшить их количество. 2) В работе широко используется моделирование спектров ЯМР на ядрах дейтерия с учётом влияния молекулярной подвижности дейтерированных молекул, однако в автореферате нет описания методов расчёта спектров, кроме ссылки на соответствующий раздел диссертации, расчётные же спектры представлены в большом количестве и демонстрируют прекрасное совпадение с результатами измерений, что свидетельствует об адекватности использованных моделей движения молекул.

ИНСТИТУТ КАТАЛИЗА
Вх. № 6672
ДАТА 28. 10. 2024

Указанные замечания относятся скорее к оформлению работы, не влияют на качество диссертации и не снижают надежность полученных в работе результатов и сделанных выводов.

Судя по автореферату, диссертационная работа « ^{2}H ЯМР СПЕКТРОСКОПИЯ В ИССЛЕДОВАНИИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ПОДВИЖНОСТИ В МИКРОПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛАХ: ЦЕОЛИТАХ И МЕТАЛЛ-ОРГАНИЧЕСКИХ КАРКАСАХ» соответствует требованиям Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013 года № 842 “О порядке присуждения ученых степеней” (с изменениями и дополнениями), предъявляемым к квалификационным работам на соискание ученой степени доктора химических наук, а ее автор Даниил Игоревич Колоколов заслуживает присуждения ученой степени доктора химических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Даём согласие на включение и дальнейшую обработку своих персональных данных при подготовке документов аттестационного дела соискателя ученой степени.

Багрянская Елена Григорьевна
профессор, доктор физико-математических наук,
специальность 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика
экстремальных состояний вещества,
зав. отделом физической органической химии, директор
Тел. (
Элек

Марьясов Александр Георгиевич
кандидат физико-математических наук,
специальность 01.04.17 – химическая физика, горение и взрыв, физика
экстремальных состояний вещества,
старший научный сотрудник лаборатории магнитной радиоспектроскопии
Тел.
Элек

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Новосибирский институт органической химии им. Н.Н.Ворожцова
Сибирского отделения Российской академии наук (НИОХ СО РАН)
630090, Россия, г. Новосибирск, проспект Академика Лаврентьева, д.9
Официальный сайт института web.nioch.nsc.ru
16.10.2024