

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Сергея Николаевича Беляева «Структура и свойства субнаноразмерных кластеров магния и их реакционная способность в синтезе реактива Гриньяра», представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Диссертационная работа С.Н. Беляева посвящена моделированию структуры и реакционной способности кластеров магния на основании квантово-химических расчётов. Тематика работы актуальна ввиду важности понимания механизма образования реактива Гриньяра.

С.Н. Беляев провёл большой объём квантово-химических расчётов для кластеров магния  $Mg_n$  с  $n = 2-32$  в основном и возбуждённом электронном состоянии. На основании результатов расчётов откалиброваны эмпирические параметры, что позволило расширить размер исследуемых кластеров до  $n = 80$  с использованием эмпирических потенциалов. Установив структуры и выяснив устойчивость кластеров, диссертант перешёл к рассмотрению их реакций с бромэтаном. Были установлены переходные состояния для молекулярного и радикального пути реакции, методом IRC доказано, что найденные переходные состояния связывают реагенты и продукты; рассчитаны энергии активации и энергетические характеристики процессов. Сделан вывод, что десорбция  $EtMgBr$  является основной лимитирующей стадией для кластеров со средним и большим числом атомов магния. Для моделирования гетерогенных процессов расчёты проводили не только для газовой фазы, но и для неводных растворителей различной полярности.

Работа выполнена на высоком уровне, использованный уровень теории (функционал плотности B3PW91 и базисный набор 6-311+G(2d)) представляется вполне адекватным для решения поставленных в работе задач, полученные результаты являются достоверными. Результаты работы опубликованы в 3 статьях в журналах, индексируемых в Web of Science/Scopus и представлены в 11 тезисах докладов на международных и российских конференциях.

По тексту автореферата можно задать следующие вопросы:

- 1) Из текста автореферата не ясно, в чём заключается алгоритм искусственной пчелиной колонии (стр. 14, рис. 8 автореферата).

2) Можно ли на основании накопленного большого объёма результатов квантово-химических расчётов сформулировать рекомендации для экспериментаторов в плане модификации условий проведения синтеза реактива Гриньяра?

Оценивая диссертационную работу С.Н. Беляева в целом, следует отметить, что она является законченным исследованием, позволившим существенно продвинуться в области понимания структуры и электронного строения кластеров магния и понимания механизма образования реактива Гриньяра с их участием.

Представленная диссертационная работа соответствует специальности 02.00.04 – физическая химия, по объёму проведенных исследований, их научной новизне и практической значимости безусловно удовлетворяет требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утвержденного Постановлением № 842 Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года (с изменениями постановления Правительства Российской Федерации от 21 апреля 2016 г. № 335 «О внесении изменений в Положение о присуждении учёных степеней»), а её автор Сергей Николаевич Беляев безусловно заслуживает присуждения ему искомой учёной степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Отзыв составил:

Тимошкин Алексей Юрьевич, кандидат химических наук (02.00.01 – неорганическая химия), доцент, профессор с возложением исполнения обязанностей заведующего кафедрой общей и неорганической химии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский Государственный Университет»

199034 г. Санкт-Петербург, Университетская наб. 7/9,

Тел. +7 (812) 428-4071

E-mail: a.y.timoshkin@spbu.ru

14 июня 2021 г.

*Документ передан в  
инициативном порядке.*

*Лилия Корниль*

*Тимошкин А.Ю.*

*Удостоверено*

2



*15.06.2021*