

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ф.О. Данилова
«Моделирование механизма селективного гидрирования
фенилацетилена на поверхности палладия»
на соискание ученой степени кандидата химических наук по
специальности 02.00.04 – физическая химия

Стирол является широко востребованным мономером для получения полимеров и сополимеров (акрилонитрил-бутадиен-стирола, стирол-акрилонитрила, стирол-бутадиенового каучука). Объем мирового рынка стирола сегодня достигает более 50 млрд долларов и, по прогнозам аналитиков, спрос на него в ближайшие годы будет только расти. В этой связи вопросы совершенствования технологий его производства, включая стадию очистки стирола от примесей фенилацетилена до высокой полимеризационной чистоты, становятся особенно актуальными.

Изучению механизма реакции гидрирования ацетиленовых углеводородов на Pd-содержащих катализаторах посвящено немало работ. Однако механизм процесса жидкофазного гидрирования фенилацетилена на поверхности наноразмерного палладиевого катализатора остается недостаточно изученным. Мало данных по механизму адсорбции фенилацетилена на палладии.

В данной работе Данилов Ф.О., используя методы квантовой химии, изучил строение активных центров палладиевых частиц и взаимодействие реагентов реакции гидрирования фенилацетилена с различными типами поверхности палладия. В качестве исследуемых Данилов Ф.О. взял три основных типа поверхности палладия (Pd(111), Pd(100), Pd(ребро)). Впервые проведено моделирование механизмов процесса гидрирования фенилацетилена и установлена взаимосвязь строения активного центра палладия с его активностью и селективностью в гидрировании. Данилов Ф.О. доказал, что наиболее селективно фенилацетилен гидрируется на поверхности Pd(111). При этом показано, что Pd(ребро), как и другие координационно-ненасыщенные участки (например, вершины поверхности Pd), является центром неселективного гидрирования фенилацетилена, что объясняет экспериментальные данные о снижении селективности с уменьшением размера частиц палладия.

Работа выполнена на высоком методическом уровне. Материал, представленный в автореферате, хорошо иллюстрирован, выводы корректны.

В качестве замечания отмечу, что в работе рассмотрены только три типа поверхностей наночастиц, хотя имеются и другие типы – ступенчатые и высокоиндексные поверхности, например, Pd(211), Pd(311), Pd(331). Т.к. поверхность реальных кристаллических наночастиц палладия неоднородна, то было бы интересным сравнить активность и этих поверхностей в реакции гидрирования фенилацетилена. Однако данное замечание носит рекомендательный характер и не умаляет ценности данной работы диссертанта.

Не вызывает сомнений научная новизна, достоверность и практическая значимость полученных результатов, их перспективность для совершенствования технологии получения высокоселективных катализаторов гидрирования.

Работа по совокупности полученных знаний и решений имеет большую научную и практическую ценность, по объему и содержанию соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Данилов Филипп Олегович заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 (физическая химия).

Доцент кафедры общей
химической технологии
филиала Уфимского государственного
нефтяного технического университета
в г. Стерлитамаке,
кандидат технических наук



Каримов Олег Хасанович

Почтовый адрес:

453118 Республика Башкортостан, г. Стерлитамак, Проспект Октября, 2,
филиал ФГБОУ ВО Уфимский государственный нефтяной технический университет»
в г. Стерлитамаке

Тел.: +7 (3473) 24-25-12, E-mail: karimov.oleg@gmail.com

Филиал ФГБОУ ВО Уфимский государственный нефтяной технический университет»
Подпись Каримов Олег Хасанович
заверяю.
Начальник общего отдела В.С.

