

## Отзыв

на автореферат диссертации Гуляевой Екатерины Сергеевны «Кооперация металл-лиганд и металл-металл в катализируемых комплексами марганца реакциях (де)гидрирования», представленной на соискание степени кандидата химических наук по специальностям 1.4.8 – Химия элементоорганических соединений и 1.4.4 – Физическая химия

Большинство современных химических технологий невозможно представить без использования катализаторов в протекающих процессах. Каталитическое гидрирование является одним из наиболее широко применяемых процессов гомогенного катализа, который широко востребован в химической промышленности, поэтому фундаментальные исследования реакций гидрирования является актуальной научной задачей.

В фокусе диссертационного исследования соискателя находится поиск способов кооперативной активации инертных связей комплексами марганца(I) с бидентатными лигандами в процессах гидрирования и дегидрирования. Для достижения поставленной цели были поставлены конкретные задачи: 1) исследовать процессы переноса гидрида и протона для ряда гидридных комплексов Mn(I) с бидентатными лигандами; 2) рационализировать механизм гидрирования кетонов комплексами Mn(I) с фосфин-карбеновыми лигандами, и установить влияние заместителя в мосту между донорными фрагментами лиганда на каталитическую активность; 3) Оценить каталитическую активность комплексов Mn(I) в дегидрировании амин-боранов, исследовать механизм реакции и провести оптимизацию каталитического процесса для самого активного комплекса.

Автором на высоком уровне проведена комплексная экспериментальная работа с привлечением современных физико-химических методов установления строения и свойств изучаемых соединений, которая подкреплена квантово-химическими расчетами методом функционала плотности.

Полученные фундаментальные знания о механизмах каталитических реакций с переносом ионов водорода могут быть использованы для дизайна новых эффективных катализаторов для практически важных процессов. Обнаружение нового кооперативного механизма дегидрирования амин-боранов открывает возможность реализации альтернативных подходов в создании кооперативных систем активации инертных связей. Данные о новых кооперативных механизмах для бидентатных комплексов марганца(I) возможно использовать для обоснования реакционной способности и поиска альтернативных путей реакций с более низкими активационными барьерами для релевантных каталитических систем.

Значимость полученных результатов подтверждается уровнем публикаций по теме диссертации: 4 статьи в высокорейтинговых международных научных журналах, включая один обзор! Кроме того, результаты работы были представлены на 3 научных конференциях.

Автореферат грамотно написан и хорошо структурирован. Представленный текст хорошо отражает ход работы и сделанные выводы не вызывают вопросов.

После прочтения автореферата возникло лишь одно замечание: корректно было бы заменить обозначения изомеров *mer-* и *fac-* и название геометрий *меридиональная* и *фасиальная* на принятые в русскоязычной координационной химии *ос-* и *гран-* (для изомером) и *осевая* и *граневая* (для геометрий) соответственно.

Приведенное замечание имеет лишь дискуссионный характер и не умаляет значимости полученных результатов и высокого уровня диссертационного исследования.

С учетом вышесказанного можно сделать вывод, что диссертация Гуляевой Екатерины Сергеевны «Кооперация металл-лиганд и металл-металл в катализируемых комплексами марганца реакциях (де)гидрирования» вносит существенный вклад в фундаментальное понимание природы каталитических процессов в современной элементоорганической и физической химии, а по своей актуальности, объему, новизне, научной и практической значимости результатов полностью соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук в соответствии с пунктами 9-11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней (утверждено Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 в редакции от 25.01.2024 г.), а ее автор, Гуляева Екатерина Сергеевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальностям 1.4.8 – Химия элементоорганических соединений и 1.4.4 – Физическая химия.

Доктор химических наук (1.4.1 Неорганическая химия)

Профессор РАН

Директор ФГБУН Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН  
630090 г. Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, 3, ИНХ СО РАН

Тел. +7 (383) 330-9490

Email: brylev@niic.nsc.ru

Брылев Константин Александрович

03.10.2024

