

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Кононенко Елизаветы Сергеевны «Развитие методов ядерного магнитного резонанса для исследования гетерогенных каталитических процессов гидрирования с использованием параводорода», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества»

Представленная работа посвящена разработке методов магниторезонансной визуализации гетерогенных газофазных каталитических процессов в условиях, приближенных к реальным промышленным реакторам. Хотя использование методов ЯМР и магниторезонансной томографии для неразрушающей визуализации пространственных объектов и процессов получило в последние десятилетия мощное развитие, их применение к каталитическим системам сталкивается с серьезными трудностями, связанными с невозможностью прямого использования для них стандартных методов получения сигналов достаточной интенсивности. Поскольку каталитические процессы обычно ведутся при повышенных температурах, невозможен уход в криогенные условия для повышения Больцмановской разности населенностей ядерных спиновых уровней, необходимость работы с очень подвижными газовыми средами малой плотности в корне отличается, например, от медицинского МРТ с визуализацией протонов воды или жировой ткани в практически неподвижных массивных тканях, а принципиально неустранимая и существенная объемная гетерогенность образцов и их статичность не позволяют напрямую использовать подходы ЯМР высокого разрешения с быстрым вращением и так достаточно гомогенных образцов в поле высокой однородности и селективное по частоте детектирование.

Внедрение методов гиперполяризованного ЯМР, преодолевающих проблему малой Больцмановской разности населенностей, позволило резко поднять интенсивности сигналов, но привнесло с собой и новые сложности. Применяемый автором подход «пара-водород+каталитическое гидрирование» требует для получения поляризованного продукта парного присоединения обоих протонов $p\text{-H}_2$ к ненасыщенной связи, что обеспечивает вовсе не каждый нанесенный катализатор, а немагнитное (синглетное) состояние протонов $p\text{-H}_2$ приводит к генерации в продукте не интегральной спиновой поляризации, а мультиплетного спинового порядка с нулевым интегральным сигналом, что особенно проблематично в условиях низкого разрешения, вызванного большой неоднородностью образцов. В работе совместно со специалистами по катализу изучено несколько десятков нанесенных катализаторов/реакторов, а «фундаментальные» публикации «про жизнь спинов» сосуществуют с типично прикладными каталитическими работами, где с целью оптимизации изготовлено и протестировано по 16 разных реакторов. Для конверсии мультиплетного спинового порядка в интегральную поляризацию используется подход на основе предложенного ранее коллегами по МТЦ СО РАН протокола типа модифицированного эха вне фазы (А. Н. Правдивцев, К. Л. Иванов, А. В. Юрковская, Х.-М. Фит, Р. З. Сагдеев, Докл. АН 465, 54-57 (2015)), что в условиях гетерогенных систем составляет отдельную и нетривиальную задачу, которой посвящена существенная часть работы.

В целом своевременность и востребованность предпринятого в диссертации исследования, корректность выбранных для проводимого исследования методов и подходов не вызывают никаких сомнений. В работе проведен значительный объем экспериментальных исследований и предложена убедительная интерпретация их результатов. Считаю, что автор вполне продемонстрировала свою квалификацию во всех ключевых аспектах современного исследования на стыке химической физики, материаловедения и катализа. Работа весьма

логично поставлена и выполнена, хорошо опубликована и апробирована. Я бы хотел подчеркнуть ярко выраженную прикладную направленность работы при ее большой фундаментальной глубине, а также особо выделить предпринятое автором исследование по МРТ-визуализации каталитических систем на пустотелых гранулах, что позволяет имитировать реальные насыпные катализаторы без катастрофических осложнений, вызванных неоднородностью материала, и дает возможность создать прямо в ЯМР-ной ампуле разумную уменьшенную работающую копию реального засыпного каталитического реактора.

Автореферат написан хорошим языком, тщательно вычитан и дает исчерпывающее представление о проведенном исследовании и соответствии работы всем требованиям к диссертациям. Отдельные замеченные опечатки не препятствуют пониманию, вопросов и замечаний по работе нет. Я бы хотел только попросить дать наглядное объяснение (если это возможно) тому, как использование когерентностей, а не напрямую намагниченностей, позволяет вытаскивать разрешенные спектры в условиях большой неоднородности.

Результаты проведенных исследований опубликованы в профильных международных физико-химических журналах и неоднократно докладывались на конференциях. Считаю, что диссертационная работа «Развитие методов ядерного магнитного резонанса для исследования гетерогенных каталитических процессов гидрирования с использованием параводорода» соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, и является научно-квалификационной работой, в которой решена задача изучения возможностей когерентных методов ЯМР для визуализации гетерогенных каталитических систем, что может быть использовано для оптимизации промышленных каталитических процессов, а ее автор, Кононенко Елизавета Сергеевна, заслуживает присуждения ей искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.17 – «Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества».

Стась Дмитрий Владимирович,
К.ф.-м.н., специальность 01.04.17 - химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества,
доцент, старший научный сотрудник Лаборатории быстропротекающих процессов
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского
Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Институтская ул., 3; <http://www.kinetics.nsc.ru/>
Телефон (раб.): (383) 333 1561, электронная почта: stass@kinetics.nsc.ru
17 сентября 2026 г.

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

Подпись Стась Д.В. удостоверяю



Ученый секретарь
ИХКГ СО РАН
к.ф.-м.н.
Пыряева А.П.