

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации **Бандуриста Павла Сергеевича «Влияние допирования кластеров золота и меди, стабилизированных лигандами, на окисление СО и активацию метана»**, представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук

Диссертационная работа П.С. Бандуриста представляет собой большое систематическое исследование структуры кластеров меди и золота, допированных никелем, медью и серебром. Актуальность темы исследования обусловлена тем, что стабилизированные лигандами биметаллические наночастицы являются перспективными катализаторами процессов активации малых молекул. В работе П.С. Бандуриста получены сведения о строении кластеров разного состава, а также энергетических характеристиках каталитических реакций активации CH_4 и окисления СО с их участием.

Особенно следует отметить результаты, полученные для реакции окисления СО. Показано, что наличие стабилизирующих лигандов в кластерах меди и кластерах золота, допированных медью, не препятствует их способности катализировать окисление СО до CO_2 . Этот вывод является важным для дальнейшего поиска и совершенствования катализаторов окисления СО.

Использован современный квантово-химический метод, применимость которого проверялась автором с помощью сопоставления с данными рентгеноструктурного анализа, а также расчётов с использованием метода связанных кластеров CCSD(T). В работе учитывалась возможность изменения спинового состояния моделируемой системы в ходе каталитических реакций. Всё это позволяет сделать вывод о том, что полученные в работе результаты являются достоверными, выводы - полностью обоснованными, а её автор заслуживает присуждения искомой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. - Физическая химия.

Автореферат даёт полное представление о содержании работы. Содержание автореферата соответствует содержанию опубликованных статей.

Даю согласие на обработку моих персональных данных диссертационному совету.

Доктор химических наук,
старший научный сотрудник
кафедры физической химии
Химического факультета
Московского государственного
университета имени М.В.Ломоносова,
119991, г. Москва, Ленинские годы 1, стр. 3,
Тел.: +7 (985) 1700143,
Эл. почта: leila_ust@mail.ru

Устынюк Лейла Юрьевна

3.06.2025

