

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Бандуриста Павла Сергеевича на тему «Влияние допирования кластеров золота и меди, стабилизированных лигандами, на окисление СО и активацию метана», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия

Автореферат диссертации Бандуриста П.С. содержит краткое изложение оригинального научного исследования на актуальную тему современной физической химии, выполненного на базе Лаборатории молекулярной спектроскопии кафедры физической химии ФГБОУ ВО МГУ им. М.В. Ломоносова под руководством д.х.н. Пичугиной Дарьи Александровны. Диссертационная работа Бандуриста П.С. посвящена исследованию биметаллических нанокластеров, стабилизированных лигандами. Это перспективное направление теории гетерогенного катализа и физики функциональных наноматериалов, поскольку в работах последних лет показаны перспективные каталитические свойства нанокластеров металлов, как допированных вторым металлом, так и стабилизированных лигандами. С помощью квантово-химического моделирования определялось влияние как типа лиганда, так и сорта допирующего атома на реакции окисления СО и конверсии метана. Моделями наночастиц были выбраны кластеры золота, допированные медью и серебром, содержащие 20 и 15 атомов, и кластеры меди, допированные никелем, содержащие 12 атомов. В качестве лигандов кластеров золота были выбраны тиолатные комплексы SCH_3 , кластеров меди – фосфиновые комплексы PH_3 и атомы S, O. Расчет структуры ряда кластер был выполнен впервые. Методика вычисления атомных структур кластеров протестирована через сравнение результатов расчетов с результатами расчёта методикой CCSD(T) и экспериментов для похожих кластеров и двухатомных соединений.

Для всего указанного набора кластеров, стабилизированных лигандами, было проведено исследование влияния допированного атома в зависимости от места замещения. На основании анализа относительных энергий установлено, что наиболее стабильными являются структуры кластеров золота с допированным атомом меди в ядре и на оболочке кластера, в то время как атом серебра стабильно допируется в центре. Изомер кластера меди с атомом никеля, связанным с фосфиновым лигандом, имеет более низкую энергию. Таким образом, атомная структура лигандных биметаллических кластеров прошла тщательный анализ как на влияние допирования атомами другого металла, так и на влияния типа лиганда. Далее через вычисление энергий взаимодействия, разрыва связи и активации был проведен анализ влияния допирования и лигандов на реакции окисления СО и разрыва связи С-Н в реакции конверсии метана. Было показано, что присутствие гетероатомов и сохранение лигандной оболочки улучшает каталитические свойства кластеров. Кроме того, по всем полученным результатам окисления СО был проведен корреляционный анализ, который показал, что более сильная энергия взаимодействия СО с кластером соответствует большей энергии активации реакции. Данные относительно адсорбционных свойств выбранных кластеров являются актуальным и новым исследованием, поскольку касаются не только практического применения биметаллических лигандных кластеров, но и улучшают понимание механизма реакций для этих нанообъектов.

По теме диссертации опубликовано 3 полноценных публикации в рецензируемых научных изданиях, относящихся к журналам К1 и К2 в классификации ВАК Минобрнауки РФ, а также тезисы докладов на российских и международных конференциях.

Диссертация является актуальной научно-квалификационной работой и соответствует всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата химических наук в соответствии с п.9

«Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного
Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г.
№842, а ее автор, Бандурист Павел Сергеевич, заслуживает присвоения
степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – Физическая
химия

Рецензент: Дохликова Надежда Владимировна, кандидат физико-
математических наук, старший научный сотрудник лаборатории 0142
«Химическая физика наноструктур» ФГБУН Федерального
исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова
Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)

89671521801, dokhlikovanv@gmail.com

Согласна на включение отзыва в персональное дело диссертанта и
дальнейшую обработку моих персональных данных в объеме, необходимом
для процедуры защиты диссертации Бандуриста П.С. исходя из нормативных
документов ВАК при Минобрнауки РФ

19.05.2025



Дохликова Надежда Владимировна

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный
исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской
академии наук

Адрес: 119991, г. Москва, ул. Косыгина, д.4

Телефон: +7 499 137-29-51; +7 495 939-72-03

Электронная почта: scr@chph.ras.ru

Адрес в сети интернет: <https://www.chph.ras.ru/>



Надежда Владимировна Докликова, Н.В. заверяю
Учредитель секретарь ФИЦ ХФ РАН *Дохликова Н.В. заверяю*
Дохликова Н.В.