

123298, г.Москва, ул.3-я Хорошёвская, д.12, эт.13, комн.35
Тел.: +7 (499) 704-25-81, E-mail: info@kintech.ru
www.kintechlabs.com/ru

ОКПО 69752848, ОГРН 1117746082926
ИНН 7734651111, КПП 773401001

Отзыв

на автореферат диссертации **Бандуриста Павла Сергеевича**
«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 (химические науки)

Одним из основных направлений развития современной физической химии в области катализа является квантово-химическое моделирование каталитических систем с целью определения факторов, положительно влияющих на их активность или селективность в тех или иных процессах. Актуальность диссертационной работы Бандуриста П.С. состоит в изучении и установлении влияния допированного гетероатома и присутствия лигандов на энергии активации окисления СО и разрыва связи С–Н в метане, протекающих на монометаллических (Au, Cu) и биметаллических (Au-Cu, Cu-Ni) кластерах, стабилизированных тиолатными и фосфиновыми лигандами. Актуальность данной работы подкреплена детальным изучением механизмов реакций и сравнением энергетических барьеров реакций, протекающих на разных типах систем.

Выносимые на защиту научные положения и выводы, изложенные в автореферате, несомненно, имеют научную новизну, в полной мере обоснованы и доказаны результатами проведенного систематического моделирования окисления СО и разрыва связи С–Н на серии монометаллических и биметаллических кластеров, включающего в себя расчет структур участников реакций, в частности, переходных состояний.

Наиболее значимыми результатами являются:

- рассчитаны структуры изомеров биметаллических кластеров Au-Cu и Au-Ag, стабилизированных тиолатными лигандами, установлено, что атом меди может находиться как в ядре, так и в оболочке, в отличие от атома серебра, для которого характерно расположение в ядрах кластеров. Также на основе ранее экспериментально полученного сульфидного кластера меди, стабилизированного фосфиновыми лигандами, рассчитаны его биметаллические аналоги с никелем, как сульфидного, так и оксидного типов;
- установлено, что оксидные биметаллические кластеры Cu-Ni с низким содержанием Ni, не содержащие фосфиновые лиганды, имеют высокие перспективы в активации метана.
- построены энергетические профили окисления СО на кластерах $\text{Cu}_{12}\text{S}_6(\text{PH}_3)_8$ и Cu_{12}S_6 , показана положительная роль лиганда на снижение энергетического барьера лимитирующей стадии;
- показано положительное влияние допирования тиолатного кластера золота атомом меди на активацию молекул СО и O_2 , установлено, что подобного эффекта при допировании атомом серебра не наблюдается.

Результаты, полученные в рамках настоящего исследования, позволяют на атомном уровне установить положительное влияние допирования атомом меди тиолатных кластеров золота на окисление СО, протекающее с их участием. Также полученные результаты позволяют определить влияние наличия лигандной оболочки и типа системы (сульфидная или оксидная) на величины энергетических барьеров разрыва связи С–Н в метане. Полученная фундаментальная информация может способствовать пониманию механизмов

данных реакций с целью создания эффективных катализаторов на основе биметаллических наночастиц Au-Cu и Cu-Ni.

Достоверность полученных результатов подтверждена тем, что работа выполнена с применением современных физико-химических расчетных методов исследования, а также сравнением полученных результатов с имеющимися литературными данными.

Основные результаты диссертационной работы в достаточной мере апробированы соискателем в материалах всероссийских, международных конференций и изложены в 3 статьях в журналах, рекомендованных ВАК и индексируемых в международных базах Scopus, Web of Science, RSCI.

По автореферату имеется следующее замечание: плохо читаемые или отсутствующие указания межатомных расстояний в структурах переходных состояний, приведенных на рисунках. Данное замечание не снижает высокой оценки работы Бандуриста П.С.

Содержание автореферата дает полное представление о выполненной работе и позволяет сделать следующее заключение:

Диссертационная работа с учетом своей актуальности, научной новизны, использованию современных методов исследований и по уровню обсуждения полученных результатов соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и по всем критериям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. в действующей редакции), а ее автор, Бандурист П.С., заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия.

Даю согласие на обработку моих персональных данных диссертационному совету.

Кандидат физико-математических наук,
научный сотрудник отдела материаловедения ООО "Кинтех Лаб"
Польнская Юлия Геннадьевна

06 июня 2025 года

Контактные данные:

Тел.: 8(916)698-51-64, e-mail: yupol@kintechlab.com

Специальность, по которой защищена диссертация: 02.00.04 – Физическая химия, 02.00.17 – Математическая и квантовая химия (физико-математические науки).

Адрес места работы:

123298, Россия, г. Москва, ул. 3-я Хорошевская, д. 12.

ООО "Кинтех Лаб", отдел материаловедения

Тел.: 8(916)698-51-64, e-mail: yupol@kintechlab.com

Подпись научного сотрудника отдела материаловедения ООО "Кинтех Лаб"
Польнской Ю.Г. удостоверяю:

и. бухгалтер
Карасев ЕВ

06.06.2025

