

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

В диссертационной работе Бандуриста Павла Сергеевича проведен расчет строения ряда биметаллических кластеров ($\text{CuAu}_{19}(\text{SCH}_3)_{16}$, $\text{AgAu}_{19}(\text{SCH}_3)_{16}$, $\text{CuAu}_{14}(\text{SCH}_3)_{13}$, $\text{Cu}_{11}\text{NiS}_6(\text{PH}_3)_8$, $\text{Cu}_{11}\text{NiO}_6(\text{PH}_3)_8$, $\text{Cu}_{11}\text{NiS}_6$, $\text{Cu}_{10}\text{Ni}_2\text{O}_6$), а также монометаллических ($\text{Cu}_{12}\text{O}_6(\text{PH}_3)_8$ и Cu_{12}O_6). Проведено моделирование их взаимодействия с молекулами СО и кислорода. Также показано, что допирование кластеров золота атомами меди способствует активации молекул реагентов в реакции окисления СО. Установлено положительное влияние лиганда на снижение энергетического барьера в данном процессе, а также найдена корреляция между энергией активации окисления СО и энергией его взаимодействия с кластером.

Актуальность темы диссертационной работы обусловлена тем фактом, что в литературе нет достаточной информации о влиянии допирования кластеров металлов, стабилизированных лигандами, на их реакционную способность. Также отсутствуют данные о строении активных центров биметаллических кластеров, стабилизированных лигандами, и механизме каталитических реакций с их участием. Многие аспекты в изучении данных каталитических процессов остаются недостаточно исследованными, что определяет актуальность дальнейших научных исследований в этой области.

С точки зрения практической значимости данной диссертационной работы, в первую очередь, стоит отметить, что полученные в рамках квантово-химических расчетов результаты и выявленные в результате исследований закономерности могут быть использованы для понимания механизмов данных реакций с целью создания активных катализаторов на основе биметаллических наночастиц Au-Cu и Cu-Ni, а также их монометаллических аналогов, стабилизированных лигандами.

В работе приведен достаточный объем экспериментальных данных, интерпретация и представление которых подтверждает обоснованность сделанных выводов. Работа выполнена на хорошем уровне, содержит большой теоретический и экспериментальный материал, проработку научной новизны и практической значимости.

По своей актуальности, научной новизне, объему выполненных исследований, практической значимости полученных результатов и уровню апробации представленная работа соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Бандурист Павел Сергеевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия.

Старший научный сотрудник
Лаборатории физико-химических основ
хроматографии и хромато-масс-спектрометрии
ИФХЭ РАН,
кандидат физико-математических наук

Самухина Юлия Владимировна

Подпись Самухиной Ю.В. заверяю

Дата 11.06.25 М.П.

ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН
119071, г. Москва, Ленинский проспект, д. 31, корп. 4
Тел./факс +7 (495) 952 53 08, +7 (495) 633 77 02; juliesam2008@mail.ru

Юлия Самухина Ю.В. подтверждаю
спе.о.н. Е.В. Макарова

