

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы 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 по
специальности 1.4.4. – Физическая химия

В настоящее время наблюдается возрастающий интерес к таким реакциям, как окисление СО, а также углекислотная конверсия метана в связи с их практической значимостью, а также в связи с огромным потенциалом применения современных каталитических систем, представляющих собой сплавные и допированные наноразмерные частицы и кластеры металлов, а также одноатомные катализаторы. Известно, что исследование поведения кластерных катализаторов *in situ* сопряжено с рядом трудностей, что обуславливает необходимость дополнения экспериментальных данных результатами квантово-химических расчетов. Таким образом, представленная соискателем диссертационная работа, посвященная квантово-химическому моделированию биметаллических кластеров Au-Cu и Cu-Ni, стабилизированных тиолатными и фосфиновыми лигандами, обладает как практической, так и теоретической значимостью.

Текст автореферата изложен достаточно подробно. Диссертация представляет собой завершенное исследование. Однако, в качестве пожеланий, хотелось бы в будущем увидеть расчеты более крупных кластеров, например, Au₂₅, которые, согласно современным экспериментальным данным, проявляют наиболее высокую активность и селективность в окислении СО, а также кластеров и наночастиц, нанесенных на различные твердые носители.

По теме диссертации опубликовано 3 статьи в рецензируемых изданиях, индексируемых в Scopus, Web of Science и RSCI, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ. Результаты научного исследования подтверждены участием в работе научных мероприятий: опубликовано 8 тезисов докладов на международных и российских научных конференциях.

К автореферату возник ряд замечаний и вопросов:

1. Для реакции углекислотной конверсии метана, как один из недостатков Ni-содержащих систем, упомянуто их закоксовывание. Согласно современным данным, закоксовывание заметно снижается при уменьшении размеров частиц Ni до < 5 нм. Является ли необходимым в случае малых кластеров допирование вторым металлом? Почему в качестве основного металла для построения кластера Cu-Ni была выбрана медь, а не никель – наиболее активный металл для углекислотной конверсии метана?

2. Учитывались ли релятивистские эффекты для других металлов, кроме золота? Проводилась ли оптимизация мультиплетности при каждом изменении геометрии кластера/добавлении лигандов?

3. В автореферате утверждается, что допирование тиолатных кластеров золота медью незначительно влияет на E_{H-L} . Из данных, представленных в Таблице 1,

очевидно, что E_{H-L} в случае Cu-Аи изменяется. Действительно ли эти изменения можно считать незначительными?

Указанные вопросы и замечания носят дискуссионный характер и не снижают общего положительного впечатления от диссертационной работы.

Диссертационная работа по объёму выполненных исследований, новизне и достоверности полученных результатов и выводов удовлетворяет требованиям пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. №842 (в действующей редакции), а её автор – Бандурист Павел Сергеевич, заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Даю согласие на обработку моих персональных данных диссертационному совету.

Доцент кафедры биотехнологии,
химии и стандартизации федерального
государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего образования «Тверской
государственный технический университет»,
к.х.н.

(02.00.15 – Катализ), доцент

 Никошвили Линда Жановна

Подпись заверяю,
ученый секретарь ученого совета ТвГТУ
д.т.н., проф. А.Н. Болотов
(Гербовая печать) «26» 05 2025 г.



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный технический университет» (ТвГТУ)

170026, г. Тверь, наб. А. Никитина, 22

Тел.: +7(4822)789348

E-mail: nlinda@science.tver.ru