



MPI für Festkörperforschung · Postfach 80 06 65 · D-70506 Stuttgart

Heisenbergstr. 1
70569 Stuttgart, Germany

Phone: +49 0711-689-1410

Fax: +49 0711-6891722

Email:

i.moudrakovski@fkf.mpg.de

October 5, 2016

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Папуловского Евгения Сергеевича « ^{93}Nb ЯМР кристаллография как метод исследования строения Nb центров в оксидных Nb катализаторах», представленной на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 — физическая химия и 02.00.15 — кинетика и катализ.

Среди многочисленных физико-химических методов используемых для исследования явлений гетерогенного катализа, спектроскопия Ядерного Магнитного Ресонанса в твердом теле занимает одно из центральных мест. В первую очередь это следствие его уникальной чувствительности к локальному окружению атомов и способности предоставлять информацию на молекулярном уровне как о структуре катализатора, так и о динамических процессах на поверхности и в объеме катализатора. Техническое развитие метода в последние 20 лет, в сочетании с успехами квантовомеханических расчетов в твердом теле, вывели его на качественно новый уровень так называемой ЯМР кристаллографии. ЯМР кристаллографический подход обещает быть особенно информативным при изучении систем с близким порядком, недоступных традиционным диффрактографическим методам рентгеновской и нейтронной кристаллографии.

При всем очевидном потенциале подхода, применение ЯМР кристаллографии к вадрупольным ядрам еще довольно ограничено. Приложение же метода к таким комплексным системам как гетерогенные катализаторы часто рассматривается как дело достаточно отдаленного будущего. В этом смысле данная диссертация представляет собой двойной успех. В работе не только развиты и разработаны подходы ЯМР кристаллографии на ядре ^{93}Nb , но и успешно продемонстрировано их применение для изучения поверхностных центров в нанесенных Nb/Al катализаторах.

Предмет представленной работы – состояние Nb в ниобиевых катализаторах - является особенно трудной проблемой твердотельного ЯМР в силу специфического, и не всегда благоприятного сочетания спектроскопических параметров. В этой связи очень логично, что работа начата с систематического изучения спектров и квантово-химических расчетов соединений с известной структурой и координацией ниобия. Систематическое сочетание

квантово-химические расчетов и современных экспериментальных методов ЯМР, образуют прочный фундамент для построения надежных моделей локального окружения ниобия в нанесенных катализаторах. Замечу, что здесь мы уже имеем дело не с простыми качественными моделями, показывающими только общий характер состояния Nb. Построенные модели имеют вполне количественное описание, включающие состав координационного окружения, длины связей, наиболее вероятное расположение центров на структурных элементах поверхности.

Суммируя вышесказанное, было бы трудно переоценить значение результатов представленных в диссертационной работе Евгения Папуловского. Подходы для интерпретации спектров ^{93}Nb и моделирования на их основе молекулярных комплексов ниобия, развитые в диссертации, являются несомненным успехом в развитии спектроскопического подхода исследования процессов гетерогенного катализа. Все выводы и заключения работы сделаны на основании глубокого понимания вкладов и составляющих изучаемых физико-химических процессов. В целом работа является хорошим примером удачного сочетания и взаимопроникновения фундаментальных и прикладных подходов для решения комплексных проблем современной химии.

Оценивая работу по содержанию автореферата, можно с уверенностью утверждать, что по объёму выполненного исследования, научной и практической значимости, диссертационная работа Е.С. Папуловского соответствует квалификационным требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присвоения учёной степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 — физическая химия и 02.00.15 — кинетика и катализ.

NMR Scientist

Department of Physical Chemistry of Solids

PhD / Кандидат Химических Наук

Moudrakovski Igor / Мудраковский Игорь

Max Planck Institute for Solid State Research

Heisenbergstrasse 1, 70569

Stuttgart, Germany

Phone: +49 711-689-1410

Email: i.moudrakovski@fkf.mpg.de

October 5, 2016