

ОТЗЫВ

научного руководителя на диссертационную работу Е.С. Папуловского « ^{93}Nb ЯМР кристаллография как метод исследования строения Nb-центров в оксидных Nb-катализаторах», представленную на соискание учёной степени кандидата химических наук по специальностям 02.00.04 — «физическая химия» и 02.00.15 — «кинетика и катализ»

Папуловский Евгений Сергеевич пришёл в группу твёрдотельной ЯМР спектроскопии Института катализа в 2009 году, во втором семестре третьего курса. Евгений Сергеевич обучался на кафедре физических методов исследования твёрдого тела магистратуры физического факультета НГУ, который успешно закончил в 2012 году. На данный момент он является аспирантом четвёртого года обучения очной аспирантуры Института катализа им. Г.К. Борескова.

Работа Евгения Сергеевича выполнена на стыке экспериментальной ЯМР спектроскопии и квантовохимических методов расчёта структуры и ЯМР параметров периодических систем, совместное применение которых в современной ЯМР спектроскопии выделились в новое направление — ЯМР кристаллографию, что открывает новые возможности в ЯМР исследовании таких сложных систем как гетерогенные катализаторы, в данном случае — ниобийсодержащие.

В экспериментальной части Евгений Сергеевич, используя методы современной ЯМР спектроскопии в твёрдом теле, такие как съёмка образцов в существенно различных по величине магнитных полях с разными скоростями вращения образцов под магическим углом и обработкой спектров методами SATRAS (Satellite Transition Spectroscopy — детальная спектроскопия сателлитов вращения) и MASSA (MAS and Static Spectra Analysis — одновременный анализ статических и MAS спектров), определил ЯМР параметры (тензоры химического сдвига и ядерного квадрупольного взаимодействия) для большого количества индивидуальных соединений ниобия.

Теоретическую часть работы Евгений Сергеевич выполнял с большим интересом, он успешно освоил метод GIPAW (Gauge-Including Projector Augmented-Wave), предложенный С. Pickard для расчёта химических сдвигов ЯМР в периодических структурах.

В диссертационной работе Евгений Сергеевич расширил набор корреляций между параметрами ЯМР ниобия и структурой его локального окружения, продемонстрировал успешное использование теоретических методов для подбора параметров спектров ЯМР в сложных случаях, предложил теоретическую модель строения ниобиевых частиц на

поверхности оксида алюминия для изолированных ниобиевых частиц, слабо ассоциированных частиц, а также для катализаторов, достигших монослойного покрытия и выше.

Используя предложенную модель, Е.С. Папуловский получил интересные и значимые данные о поверхности ниобий-алюминиевых катализаторов, о влиянии начальной стадии приготовления катализатора на строение ниобиевых поверхностных центров. Полученные результаты о координации ниобиевых частиц на поверхности оксида алюминия являются важными для понимания строения активного компонента этих катализаторов.

Успехи Евгения Сергеевича не остались незамеченными, он был удостоен первым местом на студенческой конференции МНСК и на мемориальном семинаре, посвящённом дню рождения академика К.И. Замараева.

Евгений Сергеевич, творческий, увлечённый специалист, серьёзно относится к работе, самостоятелен и настойчив в проведении исследований, берётся за самые непростые задачи и умеет находить их решения. Он глубоко порядочный и ответственный человек, пользуется уважением в коллективе, прекрасно владеет современными компьютерными возможностями.

Не вызывает сомнения, что диссертация Е.С. Папуловского соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а сам Евгений Сергеевич заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук.

Ведущий научный сотрудник,
руководитель группы твердотельной ЯМР спектроскопии,
доктор химических наук

О.Б. Лапина

Старший научный сотрудник лаборатории квантовой химии,
кандидат физико-математических наук

А.А. Шубин

25.05.2016

Подпись удостоверяю,
Учёный секретарь ИК СО РАН, д.х.н., проф.

Д.В. Козлов