ЗАКЛЮЧЕНИЕ

комиссии диссертационного совета 24.1.086.01 на базе ИНХ СО РАН
по диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук
Панфиловой Алины Дмитриевны «Высокодисперсный никель на пористом азотсодержащем углероде: синтез и каталитические свойства в реакции разложения газообразной муравьиной кислоты» по специальности 1.4.4. Физическая химия

Комиссия диссертационного совета 24.1.086.01 на базе ФГБУН Институт неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН в составе: председателя – доктора химических наук, доцента **Шубина Юрия Викторовича**, членов комиссии – доктора химических наук, профессора **Коренева Сергея Васильевича,** доктора химических наук **Наумова Николая Геннадьевича**, в соответствии с п. 31 Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук, утвержденного приказом Минобрнауки России от 10 ноября 2017 г. № 1093 (в ред. от 14.12.2023 г.), на основании ознакомления с диссертацией на соискание ученой степени кандидата химических наук **Панфиловой Алины Дмитриевны** и состоявшегося обсуждения приняла **следующее заключение.**

1. Соискатель ученой степени кандидата химических наук соответствует требованиям п.п. 2-4 Положения о присуждении ученых степеней (утв. Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.02.2013 г. № 842 в ред. от 25.01.2024 г.), необходимым для допуска его диссертации к защите.
2. Диссертация на тему «Высокодисперсный никель на пористом азотсодержащем углероде: синтез и каталитические свойства в реакции разложения газообразной муравьиной кислоты» в полной мере соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия, к защите по которой представлена работа.
3. Основные положения и выводы диссертационного исследования отражены в шести статьях, опубликованных **Панфиловой Алиной Дмитриевной** в рецензируемых международных журналах, индексируемых в международных информационно-библиографических системах Web of Science и Scopus, а также в тезисах 17 докладов на российских и международных научных конференциях. Представленные соискателем сведения об опубликованных им работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, достоверны.
4. Оригинальность текста диссертации составляет не менее 90 % от общего объема текста; цитирование оформлено корректно по всему тексту; заимствованного материала, использованного в диссертации без ссылки на автора либо источник заимствования, не обнаружено; научных работ, выполненных соискателем ученой степени в соавторстве, но без ссылок на соавторов, не выявлено. Текст диссертации, представленной в диссертационный совет, идентичен тексту диссертации, размещенному на официальном сайте ИНХ СО РАН.
5. Диссертационная работа посвящена установлению взаимосвязей «синтез-структура-свойства» в отношении пористых азотсодержащих углеродных материалов (N-ПУМ) и нанесенного на них никеля. N-ПУМ были синтезированы методом химического осаждения из газовой фазы (CVD) ацетонитрила на темплатные частицы смешанного состава

$CaCO_3$/CaO, получаемые *in situ* из тартрата кальция. Варьирование температуры синтеза с 650 °C до 900 °C непосредственно влияет на состав темплатных частиц, что, в свою очередь, определяет текстурные характеристики (удельная площадь поверхности, пористость) материала, и содержание и состав кислородных и азотных функциональных групп, образующихся на поверхности слоев ПУМ. Дополнительно N-ПУМ были получены путем термической обработки предварительно фторированного ПУМ состава $CF_{0.55}$ газообразным NH_3 при варьировании температуры, скорости потока NH_3 и длительности обработки. Подобранные условия обработки (400 °C, 120 мл/мин, 30 минут) позволяют сохранить развитую поверхность и пористость исходного ПУМ, а также достичь максимального содержания пиридинового азота 2.4 ат.%.

Нанесение никеля проведено путем пропитки N-ПУМ раствором ацетата никеля в тетрагидрофуране с последующим отжигом образца при 350 °C в инертной атмосфере. При теоретической загрузке никеля 1 масс.% на N-ПУМ, синтезированный CVD методом, получен катализатор, содержащий моноатомные никелевые центры состава $Ni{-}N_4$, что указывает на наличие в углеродной решетке двухатомных вакансий с четырьмя атомами пиридинового азота на границах. Показано образование наночастиц Ni при отжиге нанесенного ацетата в восстановительной атмосфере. Наличие в составе носителя $Ni{-}N_4$ центров приводит к кластеризации дополнительно наносимого Ni на соседних углеродных гексагонах носителя. В результате, развитая поверхность N-ПУМ и наличие высокого содержания пиридинового азота позволили нанести Ni методом пропитки моноатомно (4.9 масс.%) и в виде суб-наночастиц (7.4 масс.%).

Впервые проведено исследование каталитической активности высокодисперсного (моноатомы и суб-нанометровые частицы) Ni в реакции разложения газообразной муравьиной кислоты. Катализаторы, содержащие $Ni{-}N_4$ центры, продемонстрировали исключительную селективность получения водорода до 99 % и стабильность в течение 9 часов протекания реакции. Предложен механизм дегидрирования муравьиной кислоты и определена энергия лимитирующей стадии, заключающейся в рекомбинации атомов водорода с образованием молекулы H_2.

Комиссия рекомендует:

1. Принять к защите на диссертационном совете 24.1.086.01 на базе ИНХ СО РАН диссертацию на соискание ученой степени кандидата химических наук Панфиловой Алины Дмитриевны «Высокодисперсный никель на пористом азотсодержащем углероде: синтез и каталитические свойства в реакции разложения газообразной муравьиной кислоты».
2. Утвердить официальными оппонентами:

– **Подъячеву Ольгу Юрьевну**, доктора химических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр «Институт катализа им Г.К. Борескова Сибирского отделения Российской академии наук», г. Новосибирск;

– **Харламову Тамару Сергеевну**, кандидата химических наук, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет».

3. Утвердить в качестве ведущей организации **Институт химии и химической технологии Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение**

Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук».

_____ **д.х.н., доцент Шубин Юрий Викторович**

_____ **д.х.н., профессор Коренев Сергей Васильевич**

_____ **д.х.н. Наумов Николай Геннадьевич**

Подписи Шубина Ю.В.,
Коренева С.В., Наумова Н.Г. заверяю
Ученый секретарь ИНХ СО РАН

д.х.н. Герасько О.А. _____

17.06.2025