

Заявитель опубликовал серию работ, посвященных прогнозированию и изучению новых материалов для преобразования и хранения энергии. По выдвигаемому исследованию заявителем было опубликовано 12 работ в ведущих международных изданиях. Всего заявителем опубликовано 32 работы (h-index 10).

Были изучены катализаторы на основе наночастиц Au, Ag, Pt, Fe, размещенных на *h*-BN, исследованы особенности атомной структуры, параметры фазовых переходов в наночастицах в ходе каталитической реакции, предложены и изучены методы их получения [ACS Applied Nano Materials 2022; Applied Catalysis B: Environmental 2022; Journal of Catalysis 2021; ChemCatChem 2020]. Эти исследования показали, что наночастицы, размещенные на *h*-BN, обладают хорошей каталитической активностью в реакции гидрирования CO₂.

Влияние состава, типа структуры и локального атомного окружения в биметаллических наночастицах CuAu, PtPd, AuPd различного строения на электронные свойства, распределение заряда и энергию адсорбции CO и O на их поверхности было подробно исследовано с помощью теоретических методов [Physical Review B 2023; Physical Chemistry Chemical Physics 2023; Aggregate 2022; The Journal of Physical Chemistry C 2018]. При изучении синтеза наночастиц для каталитических применений были раскрыты важные аспекты роста наночастиц путем конденсации из газовой фазы [Journal of Aerosol Science. 2016; Phase Transitions 2017]. Эти исследования продемонстрировали большой потенциал в тонкой настройке каталитических свойств наночастиц в процессе их контролируемого синтеза.

Для поиска новых типов аккумуляторных материалов с помощью современных первопринципных расчетов систематически изучалась энергетика интеркаляции различных щелочных металлов (Li, Na, K, Rb, Cs) в бислойные графен и MoS₂, а также в гетероструктуру графен/MoS₂ [The Journal of Physical Chemistry C 2022; Nano Energy 2020]. Анализ электронных свойств,

переноса заряда и рассчитанной емкости этих структур показал их перспективность в качестве высокоёмкого анодного материала.

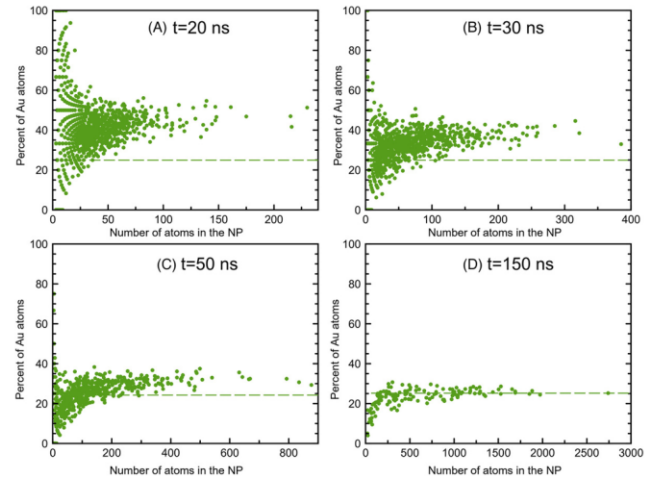
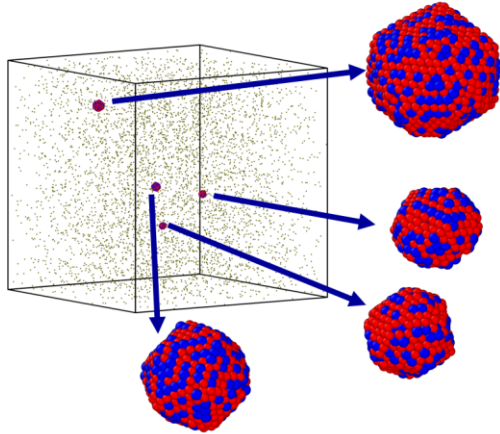
Впервые исследован новый класс материалов - полициклические ароматические углеводороды - в качестве анодов для ионных аккумуляторов. Было показано, что полициклические ароматические углеводороды обладают большей емкостью по сравнению с графитом, имеют малые диффузионные барьеры (менее 0,5 эВ), что говорит о том, что этот материал хорошо подходит в качестве анода для Li, Na, Ca- ионных аккумуляторов [Carbon 2023; Materials Today Energy 2024].

Другим способом хранения энергии являются соединения азота, где энергия хранится в азотных связях. Проблема таких структур заключается в том, что связи низкого порядка N-N, как правило, нестабильны при низких давлениях. В недавнем исследовании была показана возможность синтеза соединений с азотом K_2N_6 , стабильных при низких давлениях [Nature Chemistry 2022]. Еще одним классом материалов для преобразования энергии являются термоэлектрические материалы. Основной проблемой их широкого применения является их долговечность. В недавней работе было показано, как добавление примесей в термоэлектрический материал PbTe может повлиять на его механические свойства и продлить срок службы термоэлектрического генератора [Applied Physics Letters 2024].

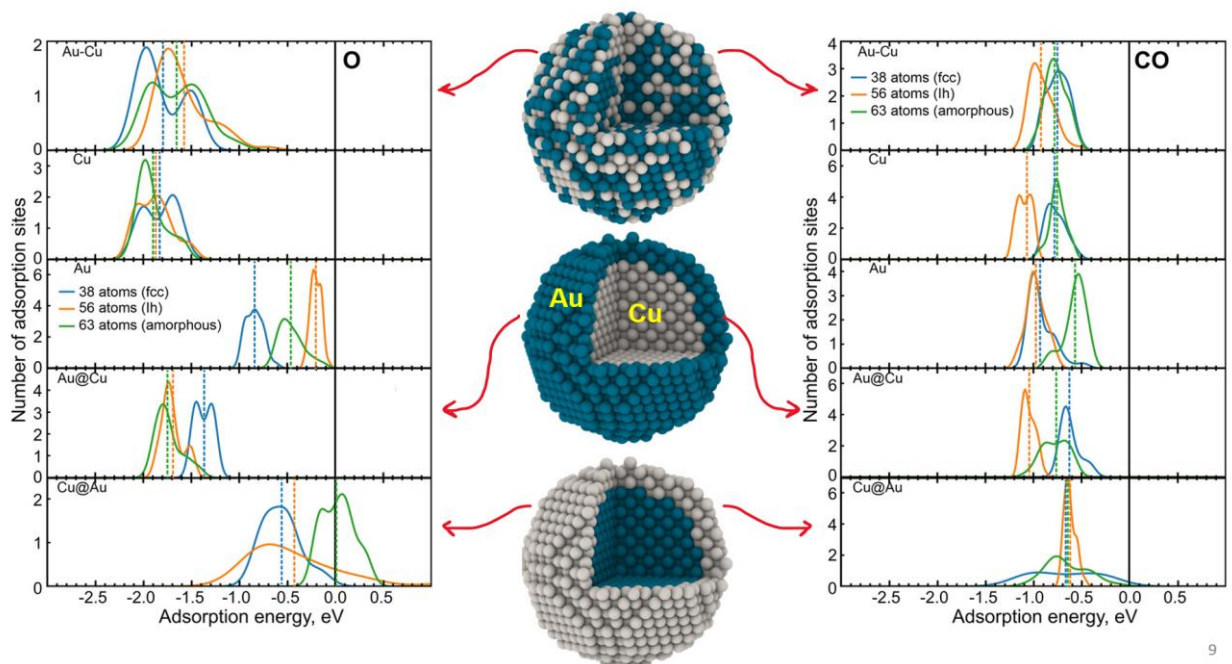
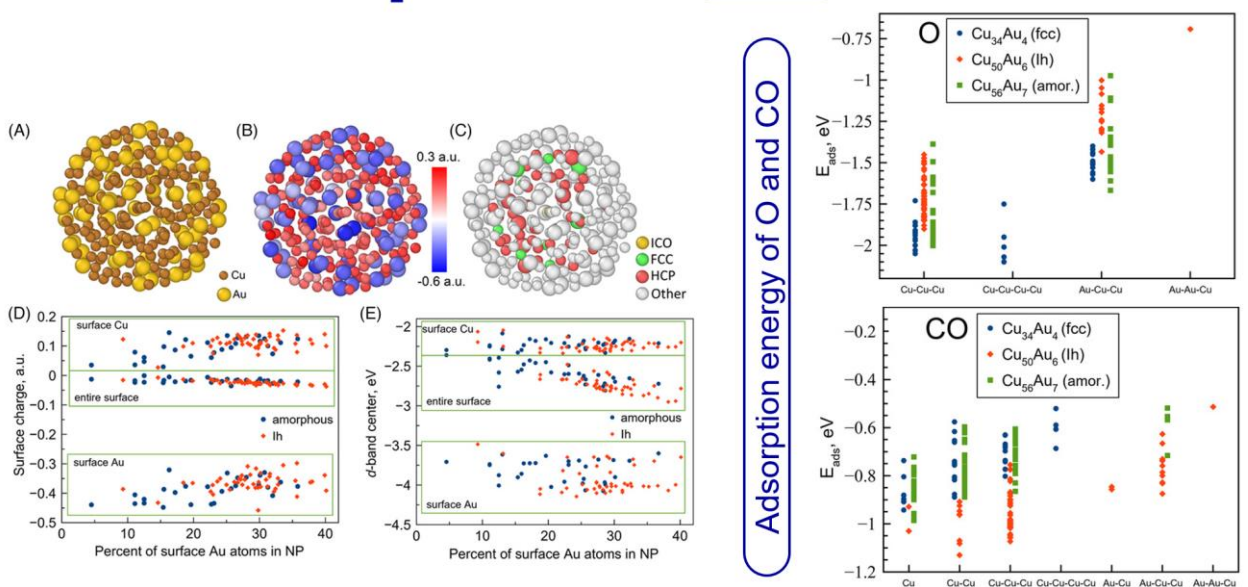
Таким образом, заявитель, безусловно, заслуживает премии премий Правительства Российской Федерации 2024 года в области науки и техники для молодых ученых за разработку научных основ создания уникальных материалов для преобразования и хранения энергии с использованием методов компьютерного и экспериментального материаловедения.

Au-Cu nanoparticles

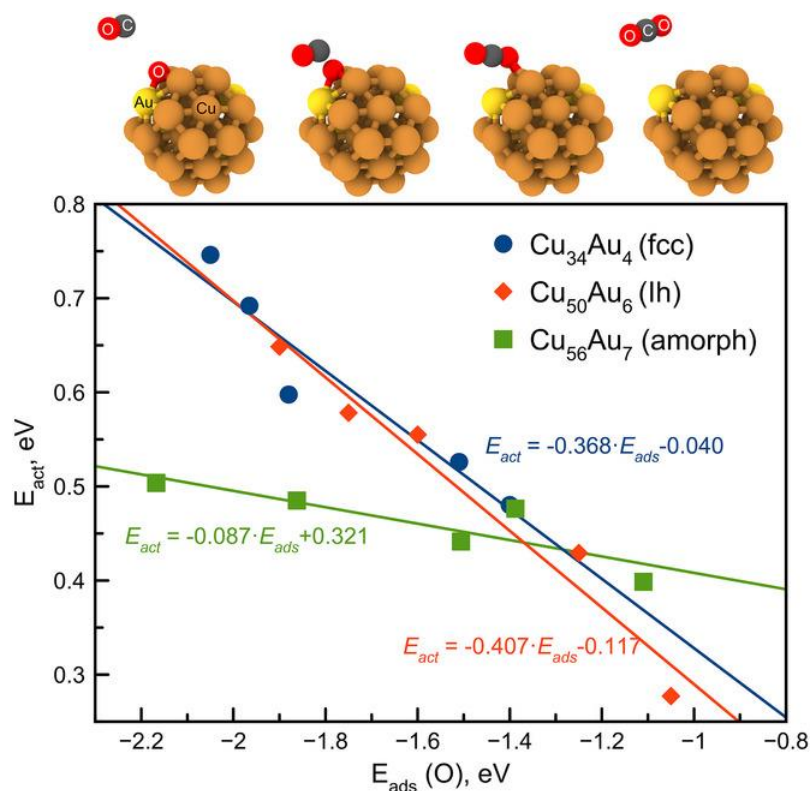
Мы можем наблюдать эволюцию состава, размера и формы наночастиц во время моделирования. В начале моделирования состав отличается от исходного 3:1. Хотя спустя долгое время счет становится 3:1. **Aggregate, e273 (2022)**



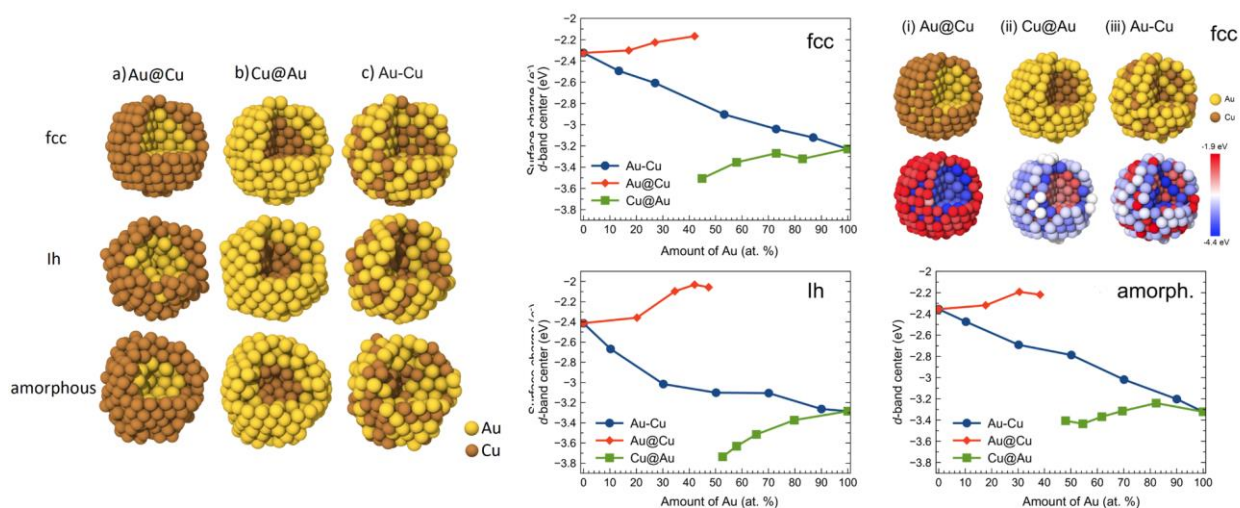
Заряды атомов, усредненные по поверхностным атомам Cu и Au, а также всем поверхностным атомам в зависимости от концентрации Au



Соотношения Брэнстеда-Эванса-Полани (БЕР) постулируют, что энергии активации и реакции для данной элементарной стадии линейно коррелируют друг с другом в пределах определенного семейства каталитических материалов. Корреляция между энергией адсорбции кислорода и энергией активации стадии окисления СО показана на схематическом изображении рассматриваемой реакции для ГЦК-кластера $\text{Cu}_{34}\text{Au}_4$ (вверху). Важно отметить, что полученные соотношения БЕР показывают, что скорость окисления СО на ГЦК и икосаэдрических кластерах может быть резко увеличена за счет более низких энергий активации на поверхностных участках со слабой связью О.



Адсорбционные и каталитические свойства кластеров, содержащих 321 атом (2 нм), были тщательно изучены. Было обнаружено большое разнообразие мест адсорбции, что показало важность рассмотрения атомных дескрипторов.



Распределения энергий адсорбции частиц O и CO, рассчитанные для 14 симметричных неэквивалентных адсорбционных центров на ГЦК наночастицах ядро-оболочка (Pd@Au и Au@Pd)

