

ОТЗЫВ НА АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ

Шермухамедова Шокирбека Абдулазиз угли

«Молекулярное моделирование переноса заряда в сложных реакционных слоях с наноразмерными эффектами», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.6 – электрохимия

Изучение механизмов переноса заряда – один из ключевых вопросов электрохимии. Теоретическое исследование подобных процессов является нетривиальной задачей, и работа Шермухамедова Ш.А. затрагивает актуальную проблему моделирования переноса заряда в сложных реакционных слоях с наноразмерными эффектами. Действительно, такие разработки могут использоваться для глубокого понимания обсуждаемых явлений и совершенствования электрохимических процессов.

Шермухамедов Ш.А. осуществил значительный объем расчётов, изучив несколько довольно различных по своей природе систем, таких как наночастицы NiCu, сложные системы Au(111)/монослой алкантиолов/Fc⁺⁰/водный раствор, Au(111)/НЧ Au/Fc⁺⁰/водный раствор и Au(111)-молекула виологена-Au(111), углеродные нанотрубки и водные растворы глюкозы с микрогетерогенной структурой. Несомненным преимуществом работы является комплексный подход к исследованию, включающий методы квантовой химии, Монте-Карло и молекулярной динамики. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментально наблюдаемыми явлениями и дают объяснение для некоторых из них. Например, согласно расчётам, наименьший активационный барьер окисления водорода на НЧ NiCu соответствует 5% содержанию меди, что совпадает с экспериментальными данными по каталитической активности.

Замечания:

- Молекула S-(CH₂)₅-CH₃ названа алкантиолом, однако такое название соответствует формуле HS-(CH₂)₅-CH₃. Следовательно, S-(CH₂)₅-CH₃ – это либо ионная, либо радикальная частица, что необходимо отобразить как в формуле, так и в названии.

Вопросы:

- Какие параметры РСМ использовались для моделирования воды и ионной жидкости? В частности, помимо диэлектрической проницаемости ϵ , значительное влияние на величину энергии сольватации может оказывать масштабирующий множитель α .

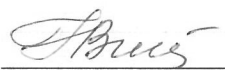
Высказанные вопросы и замечания, тем не менее, никак не снижают ценности диссертационной работы, оставившей хорошие впечатления.

Достоверность полученных результатов подтверждается использованием современных методов квантовой и вычислительной химии. Работа прошла апробацию на 8

международных и всероссийских конференциях, и по результатам исследований опубликованы 11 статей в журналах, индексируемых в Web of Science и Scopus и входящих в список ВАК (из них 6 опубликованы в журналах уровня Q1).

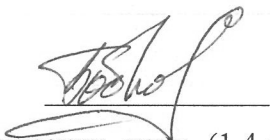
Насколько можно судить по представленному автореферату и публикациям, диссертационная работа Ш.А. Шермухамедова «Молекулярное моделирование переноса заряда в сложных реакционных слоях с наноразмерными эффектами» представляет собой цельное научное исследование в области электрохимии, выполненное на высоком профессиональном уровне и соответствующее паспорту специальности 1.4.6 – электрохимия. По актуальности, новизне и достоверности результатов представленная работа отвечает требованиям ВАК РФ, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в действующей редакции), а её автор, Шермухамедов Шокирбек Абдулазиз угли, заслуживает присуждения учёной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.6 – электрохимия.

27.11.2024



/ Витковская Надежда Моисеевна /

доктор химических наук (1.4.3 – органическая химия, 1.4.4 – физическая химия),
заведующая лабораторией квантовой химии ИГУ

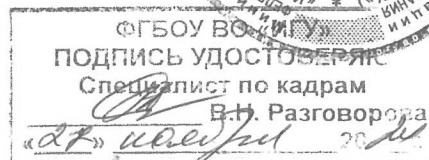


/ Бобков Александр Сергеевич /

кандидат химических наук (1.4.4 – физическая химия), старший научный сотрудник
лаборатории квантовохимического моделирования молекулярных систем ИГУ

Федеральное государственное образовательное учреждение высшего образования
«Иркутский государственный университет»

Почтовый адрес: 664003, г. Иркутск, ул. Карла Маркса, д.1, ИГУ
E-mail: vita@cc.isu.ru, alex.bobkov@isu.ru
Телефон: +7 (3952) 52-12-11



Вход. № 05-8269
« 04 » 12 2024 г.
подпись 