

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Шермухамедова Шокирбека Абдулазиз угли «Молекулярное моделирование переноса заряда в сложных реакционных слоях с наноразмерными эффектами» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.6. Электрохимия.

Диссертационная работа Шермухамедова Шокирбека Абдулазиз угли посвящена теоретическому исследованию процессов переноса заряда в электрохимических системах. Рассмотрено несколько гетерогенных реакций, протекающих в водных средах на поверхности катализаторов NiCu, Au(111), или в наноразмерных порах.

Особенностью данной работы является сочетание разных теоретических подходов для решения конкретной задачи. Так, метод Монте-Карло использован для моделирования структуры биметаллических частиц, имеющих размеры, близкие к экспериментальным. Теория функционала плотности применена для расчета плотностей электронных состояний и энергетических характеристик модельных систем. С использованием теории переноса заряда рассчитаны зависимости тока от перенапряжения и константы скорости электрохимических процессов. Методом молекулярной динамики определены энергии реорганизации растворителя и влияние температуры на скорость элементарных актов.

Таким образом, актуальность работы заключается в разработке подходов для теоретического исследования кинетики редокс-процессов, происходящих на границе раздела фаз. Предложенные подходы и разработанные программные коды могут быть использованы другими исследователями при моделировании кинетики гетерогенных электрохимических реакций с целью интерпретации экспериментальных данных и при разработке новых эффективных реакционных систем. Новизна исследования состоит в решении ряда задач, связанных с определением влияния структуры поверхности катализатора, природы растворителя, размера и заряда нанопоры на энергетику и кинетику электрохимических реакций. Автореферат написан ясным языком, с минимальным числом опечаток, материал хорошо структурирован и проиллюстрирован.

При прочтении автореферата возникли следующие вопросы:

- 1) Проводилась ли оптимизация геометрии наночастиц NiCu и золота в рамках теории функционала плотности? Если нет, то как изменение расположения атомов на поверхности, которое должно произойти в результате такой оптимизации, повлияет на плотность электронных состояний, которую диссертант использует при интерпретации эксперимента?
- 2) При моделировании редокс-процесса внутри углеродных нанотрубок получены зависимости от диаметра трубки. Какие конкретно конфигурации нанотрубок рассмотрены? Повлияет ли тип проводимости нанотрубки (металлический или полупроводниковый) на полученные энергетические и кинетические зависимости процесса?

Приведенные выше вопросы носят уточняющий характер и не снижают общей положительной оценки представленного исследования. Совокупность полученных оригинальных результатов и сформулированных автором выводов свидетельствует о том,

что диссертационная работа «Молекулярное моделирование переноса заряда в сложных реакционных слоях с наноразмерными эффектами» является оригинальной, законченной научно-квалификационной работой в области теоретического моделирования электрохимических процессов. Работа соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям и научной специальности 1.4.6. – Электрохимия, а ее автор Шермухамедов Шокирбек Абдулазиз угли заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.6. – Электрохимия.

Даю согласие на обработку персональных данных, включения их в аттестационное дело соискателя, вывешивание отзыва на сайте ФГБОУ ВО «КНИТУ».

Доктор химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, главный научный сотрудник лаборатории физикохимии наноматериалов ФГБУН Института неорганической химии им. А. В. Николаева Сибирского отделения РАН, 630090 г. Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, д. 3
Тел. +7 903 936 59 50; e-mail: bul@niic.nsc.ru

Булусева Любовь Геннадьевна

«05» декабря 2024 г.



ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ
УЧ. СЕКРЕТАРЬ ИНХСО РАН
О. А. ГЕРАСЬКО
«05» 12 2024

Вход. № 05-8314

«11» 12 2024 г.

подпись

