

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.

Исследование процессов переноса заряда в наноразмерных системах является важнейшей задачей современной электрохимии. В этой связи, диссертационная работа Ш.А. Шермухамедова, посвященная атомистическому моделированию переноса заряда в сложных системах, включающих органические монослои и металлические наночастицы, является актуальной. В работе решены важные задачи, заключающиеся в установлении природы каталитической активности наночастиц NiCu в реакции электрохимического окисления водорода и молекулярного механизма переноса электрона в микрогетерогенных системах. Это составляет научную новизну работы Шокирбека Абдулазиз угли. Результаты диссертационной работы являются практически значимыми, поскольку могут быть использованы в области электрокатализа и водородной энергетики. Достоверность полученных результатов не вызывает сомнений. Работа хорошо структурирована, изложена понятным языком и прекрасно опубликована.

Отдельно хотел бы отметить высокий уровень владения методами вычислительной химии. В своей работе Ш.А. Шермухамедов использовал весьма эффективную и перспективную комбинацию методов статистической физики и квантовой-химии: методы Монте-Карло и молекулярной динамики, методы теории функционала электронной плотности и квантово-механической теории возмущений. Это подтверждает высокую квалификацию диссертанта.

В качестве замечаний к автореферату можно отметить следующие:

1. Значительное количество опечаток – пропавшие буквы, слова и т.п.
2. Не понятно по какому параметру выполняется интегрирование в формуле для константы скорости внешнесферного переноса электрона.
3. На 9 странице автореферата и в выводе №3 утверждается, что мостиковый перенос электрона является более вероятным по сравнению с прямым переносом электрона. Однако по графикам на Рис. 7 видно, что при расстояниях Au-Fe больше 18 Å трансмиссионный коэффициент прямого переноса электрона

больше, чем мостикового, причём для всех углов наклона цепочки алкантиола.

Считаю важным прояснить этот момент.

Указанные замечания не являются критическими и не снижают общего приятного впечатления от работы. Считаю, что диссертационная работа «Молекулярное моделирование переноса заряда в сложных реакционных слоях с наноразмерными эффектами» является самостоятельно выполненной, законченной научно-квалификационной работой, соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, 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».

Доцент кафедры «Химия и химическая технология»

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Омский государственный технический университет»

644050, Сибирский федеральный округ, Омская область, г. Омск, Пр. Мира, д. 11

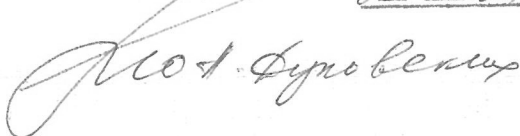
Тел.: +7(381)295-79-18 E-mail: vitaly_gorbunov@mail.ru

Кандидат химических наук



Горбунов Виталий Алексеевич

«6» декабря 2024 г.



Вход. № 05-8336
« 18 » 12 2024 г.
подпись 