

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 разработке и апробации микроскопических подходов к описанию процессов переноса заряда в электрохимических системах различной природы и состава на основе современной теории с использованием методов квантовой химии и атомистического моделирования. Установление механизма переноса заряда в различных средах и кинетических режимах представляет собой одну из важнейших задач современной электрохимии и составляет основу для решения широкого круга прикладных задач. В этой связи диссертационная работа Ш.А. Шермухамедова является несомненно актуальной; на основе разработанных подходов можно оценивать ключевые параметры современной квантово-механической теории переноса заряда, что существенно облегчает её использование для анализа конкретных электрохимических систем. Это позволяет, с одной стороны, дать более строгое описание кинетики процессов по сравнению с феноменологическими подходами, а с другой – стимулирует дальнейшее развитие теории. Таким образом, становится возможным интерпретировать экспериментальные данные, полученные современными физико-химическими методами, на более глубоком уровне, а также в ряде случаев инициировать новые эксперименты для проверки модельных прогнозов.

В диссертационной работе Ш.А. Шермухамедов представил исследование широкого круга проблем, связанных с процессами переноса заряда в наноразмерных электрохимических системах различной сложности; поставлены и успешно решены задачи, что позволило установить на микроскопическом уровне влияние различных факторов на процессы переноса заряда в различных системах. Для решения поставленных задач автор использует современные теоретические представления, методы и подходы, как квантово-химические (теорию функционала плотности), так и основанные на молекулярном моделировании (молекулярную динамику, метод Монте-Карло). Автору удалось построить детальную молекулярную картину исследуемых процессов. Разработанные подходы были апробированы при интерпретации оригинальных и литературных экспериментальных данных.

Автору удалось получить ряд важных и интересных результатов, в частности, установить природу каталитической активности биметаллических наночастиц NiCu в реакции электрохимического окисления водорода; показать предпочтительность переноса электрона по мостиковому механизму на межфазных границах; объяснить на микроскопическом уровне влияние среды на вольт-амперные характеристики электрохимического туннельного контакта с молекулой виологена; на основе информации о структурных особенностях сольватных оболочек и динамических характеристиках системы установить молекулярные аспекты механизма диффузии ионов Na^+ и Cl^- в водных растворах глюкозы с микрогетерогенной структурой. Полученные автором результаты отличает новизна; разработанные методы и подходы к оценке кинетических параметров могут быть обобщены и использованы при исследовании новых электрохимических систем.

По тексту автореферата есть несколько вопросов и замечаний. Чем обусловлен выбор размеров кластеров золота? Какими соображениями определялся выбранный для моделирования температурный диапазон при расчетах зависимости средней энергии реорганизации растворителя от геометрических параметров? Замечания носят технический характер; текст автореферата не свободен от неудачных формулировок, опечаток и пунктуационных ошибок, встречаются «нераскрытые» аббревиатуры. Таблица 1, на которую есть ссылка в разделе о биметаллических наночастицах, по-видимому, исключена из окончательной редакции текста автореферата. Есть неточности в подписях к рисункам: в подписи к рис. 9 и на легенде указана вода, хотя соответствующие данные отсутствуют; на рис. 14 не конкретизировано, чему соответствуют а и б; подпись к рис. 18 нуждается в редактировании. Вызывает сомнение, верно ли указана ссылка на работу [4] при описании результатов в последнем разделе автореферата.

Однако важно подчеркнуть, что приведенные замечания не снижают общего положительного впечатления от диссертационной работы Ш.А. Шермухамедова. Полученные результаты опубликованы в высокорейтинговых научных журналах, работа прошла хорошую апробацию. Содержание автореферата свидетельствует о том, что диссертационная работа «Молекулярное моделирование переноса заряда в сложных реакционных слоях с наноразмерными эффектами» по новизне, научной и практической значимости, объему и уровню полученных результатов, количеству и качеству публикаций является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на высоком уровне, полностью 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».

Главный научный сотрудник, заведующая лабораторией
Функциональных материалов
Институт органической и физической
химии им. А.Е. Арбузова – обособленное
структурное подразделение Федерального
государственного бюджетного учреждения науки
«Федеральный исследовательский центр «Казанский
научный центр Российской академии наук».

420008, Россия, Республика Татарстан,
г. Казань, ул. Ак. Арбузова, 8, ИОФХ им. А.Е. Арбузова –
обособленное структурное подразделение ФИЦ КазНИ РАН
Тел.: +7-(843) 272-73-43
E-mail: mbalakina@yandex.ru
Доктор химических наук
по специальности 02.00.04 – Физическая химия



Подпись *Балакина Мария Юрьевна*
Заверяю *нач. отд. ФФХ*
Анисимова Е. В.
« 16 » декабря 2024 г.

Балакина Марина Юрьевна

« 16 » декабря 2024 г.

Вход. № 05-8337
« 18 » 12 2024 г.
подпись *Стро*