

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 механизма переноса заряда в различных средах и кинетических режимах является одной из важнейших задач современной электрохимии и химии. Актуальность данных исследований обусловлена значимостью таких процессов для многих областей науки и техники, так как эти процессы играют ключевую роль в развитии новых технологий и материалов. Поскольку интерпретация экспериментальных данных по настоящее время является сложной и нетривиальной задачей, то для получения дополнительной информации о таких системах эффективными являются методы квантовой и вычислительной химии, на основе которых можно оценить ключевые параметры теории переноса заряда. Это позволяет более детально интерпретировать экспериментальные данные и в ряде случаев инициировать новые эксперименты для проверки модельных прогнозов.

В диссертационной работе Шермухамедова Шокирбека Абдулазиз угли разработаны и апробированы микроскопические подходы к описанию процессов переноса заряда в электрохимических системах с использованием методов квантовой и вычислительной химии. Проведена интерпретация экспериментальных данных на основе детальной молекулярной картины исследуемых процессов.

В диссертационной работе Шермухамедова Шокирбека Абдулазиз угли впервые:

- установлена природа каталитической активности биметаллических наночастиц NiCu в реакции электрохимического окисления водорода;
- раскрыты молекулярные детали гетерогенного переноса электрона на межфазных границах Au(111)/монослой алкантиолов/ $\text{Fc}^{+/0}$ /водный раствор и Au(111)/наночастицы золота/ $\text{Fc}^{+/0}$ /водный раствор;
- на микроскопическом уровне показано влияние среды на форму зависимости тока от перенапряжения в туннельном контакте Au(111)-молекула виологена-Au(111), наблюдаемое в эксперименте;
- сделан количественный прогноз скорости гетерогенного переноса электрона с участием редокс-пары $\text{Fe}^{3+/2+}$ в ультратонких порах, заполненных водой, моделируемых проводящими углеродными нанотрубками с диаметром от 0.8 до 3.3 нм;
- предсказан и объяснен температурный эффект в исследуемой системе; исследовано влияние двойного электрического слоя внутри проводящих цилиндрических наноразмерных пор на скорость восстановления $[\text{Fe}(\text{CN})_6]^{3-}$ в широком диапазоне перенапряжений;
- выявлены молекулярные аспекты механизма диффузии ионов Na^+ и Cl^- в водных растворах глюкозы с микрогетерогенной структурой;
- разработаны оригинальные программные коды для расчета кинетических параметров процессов переноса электрона в рамках современной квантово-механической теории.

Рецензируемая научно-квалификационная работа содержит решение задачи разработки и применения микроскопических подходов к описанию процессов переноса заряда в электрохимических системах на основе современной теории, методов квантовой и вычислительной химии.

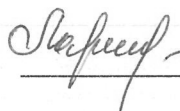
Теоретическая и практическая значимость работы заключается в том, что полученные результаты объясняют ряд фундаментальных проблем современной электрохимии, формируют основу для разработки тонких методов контроля кинетики различных электрохимических процессов, молекулярного дизайна новых катализаторов.

Результаты работы могут быть востребованы в таких областях как электрокатализ, водородная энергетика, молекулярная электроника, нанотехнологии, так как является основой для разработки новых технологий и материалов.

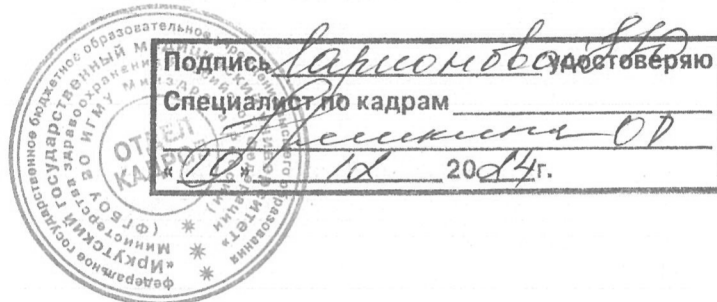
Содержание автореферата свидетельствует о том, что диссертационная работа «Молекулярное моделирование переноса заряда в сложных реакционных слоях с наноразмерными эффектами» является самостоятельно выполненной, законченной научно-квалификационной работой, соответствует требованиям ВАК, предъявляемым 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».

Профессор кафедры
медицинской и биологической физики
ФГБОУ ВО ИГМУ Минздрава России
664003, г. Иркутск, ул. Красного Восстания, 1.
8 (3952) 24-08-26, +79148750888
e-mail: lari555@mail.ru
д-р хим. наук, доцент

 Ларионова Елена Юрьевна

«10» декабря 2024 г.



Вход. № 05-8346
«20» 12 2024 г.
подпись 