

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ
на выпускную квалификационную работу
Атангулова Арслана Билаловича
«Вычислительный скрининг перспективных комплексов никеля
с хелатирующими N,O-лигандами для создания координационных полимеров»

Арслан Атангулов работает в нашей группе с момента поступления в магистратуру Института химии СПбГУ в 2018 году. Несмотря на отсутствие предшествующего опыта занятий вычислительной химией за рамками учебного процесса, он проявил ярко выраженный интерес именно к этому направлению исследований. Темой его научной работы стало систематическое вычислительное исследование новых комплексов никеля, способных выступать в качестве «строительных блоков» при создании проводящих координационных полимеров для электрохимических приложений. Эта тема является составной частью многолетнего плодотворного сотрудничества с группой доц. О.В.Левина, ведущей экспериментальные исследования в области разработки и применения координационных полимеров в энергонакопительных устройствах. Создание нового поколения полимерных материалов, не уступающих по своим характеристикам ранее исследовавшимся координационным полимерам на базе оснований Шиффа, но могущих быть синтезированными в достаточных для массового практического применения количествах, представляет собой сложную и масштабную исследовательскую задачу. В рамках этой задачи вычислительные методы могут быть использованы как для установления структурных особенностей и механизмов электрохимических процессов в уже существующих соединениях, так и для поиска перспективных объектов для дальнейшего углубленного изучения экспериментальными методами. Таким образом, работа Арслана, с одной стороны, предполагала вычислительную поддержку экспериментальных исследований, но при этом допускала достаточно высокую степень вариативности и определенную свободу в выборе методов и отчасти даже направлений поиска.

С интересом взявшись за работу в новой для него области, Арслан сохранил этот интерес на всем протяжении обучения в магистратуре. За это время он освоил основные методы и приемы квантовохимических исследований структурных и термодинамических характеристик органических и металлоорганических соединений, что позволило ему в значительной степени успешно решать стоявшие перед ним исследовательские задачи. Полученные знания и приобретенный опыт дают ему возможность как непосредственно применять их на практике, так и углублять свои познания и повышать практическую квалификацию в области вычислительной химии. В ходе работы Арслан проявлял самостоятельность и разумную инициативу, а стремление к саморазвитию достаточно плодотворно использовал и в интересах ведущейся научной работы. По-видимому, Арслан больше расположен к систематическим исследованиям, легче поддающимся планированию, чем к «точечной» работе по отдельным разноплановым объектам.

Наконец, следует отметить, что Арслан хорошо вписался в коллектив группы и стал одним из самых ответственных участников коллективных мероприятий.

Часть полученных Арсланом результатов в мае 2020 года была опубликована в журнале *Energies* (JCR 2018 IF: 2.707) в составе комбинированного экспериментально-вычислительного исследования, завершившегося созданием нового полимерного материала с высокими электрохимическими характеристиками [*Energies* 13, 2480 (2020)]. Результаты выполненного Арсланом вычислительного скрининга для большой серии потенциально перспективных лигандов демонстрируют достаточно убедительные корреляции с имеющимися в настоящее время экспериментальными данными, что также позволяет рассчитывать на их публикацию в обозримом будущем.

Согласно результатам анализа текста ВКР антиплагиатной системой РУКОНТЕКСТ, степень оригинальности представленного текста составляет 99.7%. Рассмотрение обнаруженных совпадений показывает, что они являются случайными, а некорректные заимствования полностью отсутствуют.

Считаю, что работа Атангулова А.Б. удовлетворяет требованиям, предъявляемым к выпускным квалификационным работам учащихся Института химии СПбГУ (уровень подготовки: магистратура), и заслуживает оценки «ОТЛИЧНО».

доцент Института химии СПбГУ, к.х.н.



/ Сизов В.В. /