**Сведения об официальном оппоненте**

по диссертации Тугульдуровой Веры Петровны

**«Теоретическое и экспериментальное определение механизмов реакций моно- и дикарбонильных соединений c аммиаком»**

по специальности 1.4.4 – физическая химия на соискание ученой степени кандидата химических наук

|  |  |
| --- | --- |
| Фамилия, имя, отчество | Шор Елена Александровна |
| Гражданство | Гражданин Российской федерации |
| Ученая степень (с указанием шифра специальности научных работников, по которой защищена диссертация) | Кандидат химических наук, 02.00.04 |
| Ученое звание | нет |
| Основное место работы | |
| Полное наименование организации в соответствии с уставом | Федеральное государственное бюджетное научное учреждение "Федеральный исследовательский центр "Красноярский научный центр Сибирского отделения Российской академии наук" Институт химии и химической технологии Сибирского отделения Российской академии наук (ИХХТ СО РАН) - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН |
| Наименование подразделения | Лаборатория молекулярной спектроскопии и анализа |
| Должность | Старший научный сотрудник |
| Почтовый индекс, адрес, веб-сайт, телефон, адрес электронной почты организации | 660036, Россия, г. Красноярск, Академгородок, д. 50, стр. 24  http://www.icct.ru/  Тел: +7 (391) 205-19-50  chem@icct.ru |
| Публикации по теме диссертации   * 1. публикации за последние 5 лет, в том числе обязательно указать публикации за последние три года | |
| Laletina S.S., Mamatkulov M., Shor E.A., Kaichev V.V., Genest A., Yudanov I.V., Rosch N. Size-Dependence of the Adsorp-tion Energy of CO on Pt Nano-particles: Tracing Two Intersect-ing Trends by DFT Calculations // JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C. – 2017. – V. 121. - Is.32. - P. 17371-17377. DOI: 10.1021/acs.jpcc.7b05580 | |
| Nasluzov V.A., Ivanova-Shor E.A., Shor A.M., Neyman K.M. Silver atom, trimer and tetramer species supported on a ceria nanoparticle: A density functional study // Surface Science, 2019, V.681, P. 38–46. https://doi.org/10.1016/j.susc.2018.11.002 (IF 1.997) | |
| Shor A.M., Ivanova-Shor E.A., Chiorescu I., Krüger S., Rösch N. Hydration Structure and Hydrolysis of U(IV) and Np(IV) Ions: A Comparative Density Functional Study Using a Modified Continuum Solvation Approach // J. Phys. Chem. A. - 2020. - V.124. - Is.19. - P. 3805-3814. https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpca.9b11862 (IF 2.6) | |
| Verpekin V.V., Shor A.M., Vasiliev A.D., Kondrasenko A. A., Chudin O.S., Ivanova-Shor E.A. Manganese-Gold-Manganese complex with vinylidene and acetylide units // Dalton Transactions, 2020, V.49. - Is.48. – P.17527-17531. https://doi.org/10.1039/D0DT03530K (IF 4.174) | |
| Nasluzov V.A., Ivanova-Shor E.A., Shor A.M., Laletina S.S., Neyman K.M. Adsorption and Oxidation of CO on Ceria Nanoparticles Exposing Single-Atom Pd and Ag: A DFT Modelling // Materials. – 2021. – V. 14. – N. 22. – 6888. DOI: 10.3390/ma14226888 (IF 3.623) | |