

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 Ш.А. нацелена на развитие микроскопических подходов к описанию процессов переноса заряда в некоторых электрохимических системах. При этом решаются следующие конкретные задачи: (1) исследование каталитической активности биметаллических наночастиц NiCu в реакции электрохимического окисления водорода; (2) развитие описания мостикового механизма переноса электрона на межфазной границе Au/монослой алкантиолов/раствор электролит; (3) исследование влияния природы растворителя на кинетику переноса электрона в электрохимическом туннельном контакте с участием молекулы виологена; (4) детальное исследование кинетики гетерогенного переноса электрона в ультратонких порах, заполненных раствором электролита; и, наконец, (5) установление закономерностей диффузионного транспорта ионов в вязких растворах с микрогетерогенной структурой.

Задачи соответствуют современным трендам развития электрохимии. Таким образом, тематика работы является весьма **актуальной**. Замечательной особенностью работы является то, что исследование выполняется с активным использованием методов моделирования молекулярной динамики, Монте-Карло моделирования, а также современных методов квантово-механического моделирования. На наш взгляд, такая стратегия исследования вполне адекватна общей цели данной работы. Полученные в работе результаты, обозначаемые в автореферате, имеют **теоретическую и практическую значимость**. Обращает на себя внимание тот факт, что результаты опубликованы в высокорейтинговых международных журналах, что также свидетельствует об их высоком качестве и значимости. На наш взгляд, результаты могут быть в дальнейшем использованы, в частности, для развития прецизионных методов контроля кинетики электрохимических процессов.

Диссертация «Молекулярное моделирование переноса заряда в сложных реакционных слоях с наноразмерными эффектами» представляет собой законченное научное исследование, удовлетворяющее требованиям «Положения о присуждении

ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 N 842 в ред. от 25.01.2024, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор, Шермухамедов Шокирбек Абдулазиз угли, заслуживает присуждения учёной 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».

Заведующий кафедрой вычислительной физики
ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский)
федеральный университет»,
доктор физико-математических наук, профессор



Мокшин Анатолий Васильевич

г. Казань 420008, ул. Кремлевская, 16а
ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский)
федеральный университет,
Институт физики

email: anatolii.mokshin@mail.ru
тел.: +7 843 233 77 37
факс: +7 843 238 09 94
<http://kpfu.ru/anatolii.mokshin>



«02» декабря 2024 г.

Вход. № 05-8242
« 05 » 12 2024 г.
подпись 