

## 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.

Работа Шермухамедова Ш.А. посвящена теоретическому исследованию переноса заряда в ряде наноразмерных систем на молекулярном уровне. Актуальность темы диссертационной работы обусловлена необходимостью развития микроскопических подходов к описанию электрохимических процессов в большом спектре устройств электрохимического запасаения и преобразования энергии. Сочетание современных методов вычислительной химии, таких как теория функционала электронной плотности, молекулярная динамика и метод Монте-Карло обеспечивает высокий общий уровень работы и научную новизну полученных результатов. Особенный интерес представляет исследование «мостикового» переноса и влияние кривизны поверхности на кинетику переноса заряда.

Помимо высокого фундаментального интереса с точки зрения развития современной теории электронного переноса, результаты работы имеют практическую значимость в области разработки электродных материалов для электрохимических устройств, таких как батареи, топливные элементы, а также для молекулярной электроники.

Рецензируемая научно-квалификационная работа содержит решение задачи определения основных параметров электронного переноса для ряда практически интересных систем, что имеет высокую значимость для развития химической и электрохимической отрасли знаний. Результаты работы изложены в 9 публикациях в высокорейтинговых журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, а также апробированы на профильных международных и Всероссийских конференциях, что также свидетельствует о высоком уровне диссертационной работы.

На основании автореферата диссертации можно заключить, 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».

к.ф.-м.н. Павлов Сергей Владимирович

Старший научный сотрудник Лаборатории электрохимической энергетики  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный  
институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН)

125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2

+7(495) 485-96-11

sergey.v.pavlov@phystech.edu



«11» декабря 2024 г.

*Подпись Павлова С.В. удостоверяю*

*Зед. инженер  
отдела кадров*



*Иванова Т.С.*

Вход. № 05-8323  
«16» 12 2024 г.  
подпись 