ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Малышева Максима Дмитриевича

«Моделирование сетчатых молекулярных систем различной химической природы»,

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 –Физическая химия

Представленная в автореферате работа посвящена исследованию механизмов формирования сетчатой структуры надмолекулярной организации в водных растворах серосодержащих аминокислот с электролитами и в растворах фулеренов в органических растворителях. Исследована также взаимосвязь структуры наполненных полимеров на основе эпоксидных смол с их механическим откликом на внешние воздействия.

Основное внимание в работе сделано на изучение механизма самосборки супрамолекулярных агрегатов и сетчатых структур на основе нитрата серебра и L-цистеина и его производных. Для этого было проведено полноатомное и мезомасштабное моделирование изучаемых систем. Выявленные на основе полноатомного моделирования цистеин-серебряного раствора представления о механизме самосборки были заложены в мезомасштабную модель «липких сфер» и сделаны оценки ее параметров. Разработанная модель и проведенные с ней компьютерные расчеты продемонстрировали способность мезомасштабной модели качественно воспроизводить процессы структурной организации, наблюдаемые в экспериментах с цистеин-серебряными растворами.

В работе с помощью молекулярно-динамического моделирования было исследовано структурообразование в растворе модифицированных фулеренов в 1,8-октандитиоле. Впервые удалось установить факт молекулярной самосборки модифицированных фулеренов в высококипящем растворителе. Полученные результаты позволили проинтерпретировать рентгеноструктурные и калориметрические эксперименты.

Автором разработана мезомасштабная модель нанокомпозита на основе высокосшитых полимерных матриц эпоксидных смол и наночастиц глины. Для моделирования использован метод диссипативной динамики частиц. Проведены расчеты модуля упругости нанокомпозита зависимости от формы наполнителя и его степени сшитости с полимерной матрицей. По результатам исследования сделан вывод о предсказательной способности модели.

В целом работа оставляет очень позитивное ощущение. Актуальность темы работы не вызывает сомнений. Проведено моделирование сложных молекулярных систем. Использованы современные методы молекулярного моделирования. Проведено как полноатомное моделирование молекулярных систем, содержащих до миллиона атомов, на временах до 0.2 мкс, так и

мезомасштабные модели. Для проведения расчетов потребовались очень большие объемы вычислений, предоставленные суперкомпьютерным центром МГУ. Результаты достоверны. Выводы значимы и надежны. Публикации отражают содержание диссертации.

Судя по автореферату, диссертация удовлетворяет всем требованиям ВАК, а ее автор, Малышев Максим Дмитриевич, несомненно достоин присуждения ему степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Балабаев Николай Кириллович, кандидат физико-математических наук (01.04.15 –физика и технология наноструктур, атомная и молекулярная физика), доцент, ведущий научный сотрудник Института математических проблем биологии РАН – филиала Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН.

Адрес организации:

142290, Московская область, г.Пущино, ул. проф.Виткевича, д.1, ИМПБ РАН.

Тел. +7(4967)318504.

E-mail: com@impb.ru.

Даю согласие на обработку своих персональных данных.

/Н.К.Балабаев/

17 ноября 2022 г.

Подпись Балабаева Николая Кирилловича заверяю,

Начальник ОК филиала /Т.А.Галушко/