

ОТЗЫВ

научного консультанта о диссертационной работе
Комарова Павла Вячеславовича «МНОГОМАСШТАБНОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОДИСПЕРСНЫХ ПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМ»,
представленной на соискание ученой степени доктора физико-
математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Несмотря на активное развитие теоретических подходов направленных на описание полимерных систем, сложность этих объектов делает особо актуальным разработку и применение методов компьютерного моделирования. С одной стороны, компьютерное моделирование может выступать в роли предварительного этапа изучения полимеров, предшествующего их экспериментальному исследованию. С другой стороны, сложность рассматриваемых объектов и, в особенности, наноструктурированных полимерных материалов затрудняет их экспериментальное изучение, тогда как методы компьютерного моделирования наиболее адекватны как раз наноразмерным объектам и наноразмерным структурным единицам сложных полимерных систем.

В последние годы большую популярность приобрела концепция многомасштабного моделирования. Данная концепция предполагает, что исследуемый объект рассматривается на различных структурных уровнях: уровне электронной структуры (методы *ab initio*), атомно-молекулярной структуры (атомистическое моделирование), мезоскопическом (огрубленное моделирование на масштабах много больших характерного атомного/молекулярного размера) и континуальном уровне (т.е. на уровне характерных макроскопических масштабов материала).

В ходе работы над диссертацией П.В. Комаров использовал три уровня моделирования – квантово-механический, атомистический и мезоскопический. В качестве объектов исследования выступают различные виды полимерных систем с надмолекулярной наномасштабной организацией – гидрогель на основе цистеина и нитрата серебра, коллоидная дисперсия из стержнеобразных макромолекул и наночастиц золота, ионообменные мембранны и нанокомпозиты. Несмотря на разнообразие объектов исследования, все они относятся к сложным полимерным системам, изучение которых представляет интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения.

Хотя раздел «Прикладная значимость» присутствует в авторефератах всех диссертаций, как правило он носит формальный характер применительно, по крайней мере, к теоретическим работам и к работам по компьютерному моделированию. В данном случае мы имеем дело с принципиально иной ситуацией: П.В. Комаров имеет опыт продуктивного сотрудничества с организациями, непосредственно занимающимися разработкой и производством полимерных нанокомпозиционных материалов. В частности, исследования по компьютерному моделированию полимерных нанокомпозитов и металлизации ДНК

выполнялись в рамках совместных проектов МГУ и Научно-исследовательского института промышленных технологий (Industrial Technology Research Institute, Тайвань). Корректное моделирование таких систем, состоящих из компонентов с разными типами химической связи, крайне затруднительно. Тем не менее, П.В. Комарову удалось преодолеть эти трудности и исследовать построенные модели с приемлемой для потребителей степенью точности.

Результаты докторской работы Комарова П.В. прошли хорошую аprobацию. Всего по теме докторской опубликовано 104 работы, в том числе 27 работ в изданиях, рекомендованных ВАК РФ. В 2014 г. П.В. Комаров опубликовал монографию, отвечающую теме его докторской диссертации. Результаты вошедшие в докторскую были представлены на ряде российских и международных научных конференций, и за сравнительно короткий срок работы над докторской диссертацией П.В. Комаров сформировался как серьезный специалист в области компьютерного моделирования полимерных систем, получивший признание как в нашей стране, так и за рубежом.

Даже обучаясь в докторантуре с 2008 по 2011г, П.В. Комаров продолжал свою преподавательскую деятельность в качестве доцента кафедры теоретической физики. В частности, в 2008-2009 учебном году его нагрузка составляла 317 учебных часов, включая лекции и семинары по разделу «Теоретическая механика и механика сплошных сред» курса теоретической физики, спецкурс «Методы моделирования в статистической физике» и факультатив «Программирование на С++». Насколько это было возможно, П.В. Комаров всегда шел навстречу моим пожеланиям, связанным с решением учебных и организационных кафедральных и факультетских проблем. В частности, он, несмотря на свою занятость, принимал участие в профориентационной работе по привлечению абитуриентов на физико-технический факультет.

Таким образом, я высоко оцениваю как представленную к защите докторскую, так и самого соискателя, несомненно заслуживающего присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Научный консультант, заведующий
кафедрой теоретической физики ФГБОУ ВПО
«Тверской государственный университет»,
д.ф.-м.н., профессор



Подпись Самсонов В.М.
удостоверяю:
Начальник отдела докторантур и диссертационных советов
Тверского государственного университета

М.Г. Яковлев