

О Т З Ы В
на автореферат диссертации **П.В. КОМАРОВА**
МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАНОДИСПЕРСНЫХ
ПОЛИМЕРНЫХ СИСТЕМ,

представленной на соискание
ученой степени доктора физико-математических наук
по специальности
02.00.04 – физическая химия

Компьютерное моделирование является важнейшим средством в исследовании широкого круга молекулярных систем. Беспрецедентный прогресс в развитии вычислительной техники позволяет в настоящее время переходить от изучения отдельных молекулярных систем к задачам о прогнозировании свойств сложных полимерных наноматериалов. Для этого необходимо разрабатывать и практически реализовывать вычислительные схемы, основанные на идее многомасштабного моделирования и включающие совместное рассмотрение целой иерархии моделей – квантово-механической, молекулярно-динамической, мезоскопической. Именно к такого рода работам относится докторская диссертация П.В. Комарова. Актуальность проводимого исследования совершенно очевидна.

В автореферате кратко, но достаточно ясно, изложено содержание четырех глав диссертации.

Глава 1 посвящена изучению структурообразования в цистеин-серебряном растворе (ЦСР). На основе ЦСР образуются супрамолекулярные металлокомплексные гидро-гели. Сформулирована трехэтапная модель образования этих объектов из исходных продуктов и в рамках этой модели проведены компьютерные расчеты, включающие квантово-механическую часть (метод ZINDO/1); молекулярно-динамическое (МД) моделирование с использованием силового поля AMBER; расчет крупнозернистой модели на основе методов Монте-Карло (МК) и МД. Полученная информация использована для построения мезоскопической модели ЦСП-геля.

В **Главе 2** рассмотрен процесс управляемой самосборки в растворах сильно заряженных жесткоцепных полиэлектролитов. В частности, изучается образование металлического (наночастицами золота) покрытия на фрагментах молекулы ДНК, несущих отрицательный заряд. Моделирование проведено методом МК в рамках мезоскопической модели. В результате исследования получены параметры наночастиц золота, обеспечивающие наиболее хорошее покрытие и качество проводящего слоя.

В **Главе 3** проведено сравнительное изучение структурных и транспортных свойств ионообменных мембран. С помощью целого набора разномасштабных методов моделирования было показано, в частности, что на основе амфифильных диблок-сополимеров можно создать ионообменные мембраны с высокой однородностью проникающей сети каналов. Бимодальный характер рассчитанных функций Ван-Хова для зарядов подтверждают два механизма протонной проводимости в системе (рис. 7).

Наконец, Глава 4 посвящена моделированию полимерных матриц и полимерных нанокомпозитов. Рассмотрены две проблемы – создание алгоритмов построения атомистических моделей полимерных матриц и фрагментов нанокомпозитов; использование моделей наполненных матриц для изучения структурных и тепловых свойств конструкционных материалов. Представлен алгоритм для моделирования полимерных сеток, включающий четыре этапа многомасштабных расчетов, и в качестве примера рассмотрена эпоксидная смола, а также некоторые органо-неорганические нанокомпозиты. Приводятся результаты соответствующих расчетов.

Материал в автореферате изложен четко. Работа представляет собой фундаментальное исследование, имеющее также и большую прикладную значимость. Работа поражает объемом проделанной работы и несомненно заслуживает высокой оценки.

Представляется, что автор диссертации, П.В. КОМАРОВ, несомненно, достоин присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия. Результаты диссертации отражены в 27 статьях в журналах из списка ВАК, а также в большом числе других публикациях, приведенных в автореферате; они докладывались на 25 научных конференциях.

Доктор физ.-мат. наук
профессор физического
факультета СПбГУ

/ П.Н. Воронцов-Вельяминов /
10.06.2014.

198504 Санкт-Петербург,
Ст. Петергоф, Ульяновская ул. д.1
СПбГУ, Физический факультет,
Кафедра молекулярной биофизики,
Тел. +7 812 4284555,
E-mail: voron.wgroup@gmail.com

ПОДПИСЬ РУКИ
ЗАВЕРЯЮ. НАЧ. УЧ. ЧАСТИ
ОТДЕЛА КАДРОВ
Н. А. ГОРИН

