

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о диссертационной работе 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.

Диссертационная работа Малышева М.Д. посвящена развитию и применению методов компьютерного моделирования для предсказания свойств сетчатых молекулярных систем. Изначально планировалось изучить два типа систем на основе физических и химических сеток – водные растворы нитрата серебра с серосодержащими аминокислотами и полимерные нанокомпозиты на основе эпоксидных смол.

Водные растворы серосодержащих аминокислот и их производных интересны тем, что несмотря относительную простоту (раствор аминокислоты, нитрат серебра, инициатор гелеобразования) они демонстрируют нетривиальное поведение. При этом некоторые из них способны формировать тиксотропные гидрогели при рекордно низких концентрациях реагентов ($<0.01\text{M}$). Хотя гелеобразующие свойства одной из аминокислот – L-цистеина хорошо изучены, тем не менее до сих пор было непонятно, что является необходимым условием гелеобразования в таких системах. Изучение этого вопроса представляет большой интерес для расширения фундаментальных знаний о механизмах самосборки низкомолекулярных веществ. В свою очередь эпоксидные смолы являются важным конструкционным материалом. При этом в отличие от полимеров с линейными макромолекулами моделирование эпоксидных смол представляет нетривиальную задачу. Это связано с тем, что они формируют сетчатые структуры, обладающие большой пространственной неоднородностью. Поэтому при использовании атомистических методов моделирования (которые в настоящее время могут воспроизводить структуру вещества с точностью до отдельного атома) необходимо строить относительно большие образцы моделируемых систем, что требует использования мощных суперкомпьютерных установок. Для практических нужд создания новых полимерных материалов часто бывает необходимо выполнить быстрый перебор большого количества вариантов их рецептур и диапазона влияния других факторов. Поэтому разработка упрощенных способов моделирования является актуальной проблемой для развития методологии нанотехнологий. При решении таких задач важно знать механизмы формирования изучаемых свойств, только в этом случае упрощенная модель материала может давать адекватные предсказания.

Третья система – смесь модифицированных фуллеренов с октандитиолом, вошедшая в диссертацию, интересна тем, что изначально тип ее внутренней структуры был неизвестен. Её сетчатая природа была выявлена в процессе изучения. Поэтому этот случай интересен тем, что он показывает, как использование методов компьютерного моделирования позволяет установить внутреннюю структуру молекулярной системы и объяснить экспериментальные данные.

В ходе подготовки диссертации Малышев М.Д. сумел успешно справиться со всеми поставленными перед ним задачами. Соискатель выполнил большой объем работ по построению образцов моделируемых систем, реализации процесса расчетов, обработки полученных данных и их интерпретации. Это позволило получить ряд новых и значимых результатов. Впервые была установлена структура супрамономеров, на основе которых формируется гель-сетка в созревшем цистеин-серебряном растворе (ЦСР). Изучение их

строения, в свою очередь, позволило объяснить основные детали механизма формирования надмолекулярных структур в ЦСР и разработать методику анализа водных растворов на основе нитрата серебра и серосодержащих аминокислот для предсказания их способности к гелеобразованию. Несомненный научный интерес представляет выявление факта формирования модифицированными фуллеренами сетчатой структуры в смеси с октандитиолом. Здесь следует отметить, что это соединение относится к одной из высококипящих добавок к основным растворителям, стандартно используемых при получении высокопроизводительных пластиковых солнечных батарей, в которых в качестве акцептора электронов используются фуллерены. При этом механизм действия добавок остается предметом дискуссий. Результаты, полученные в диссертации, как раз и проливают свет на этот важный вопрос и безусловно имеют важное значение для развития физико-химических основ производства полимерных солнечных батарей. Также следует отметить результаты моделирования нанокомпозитов на основе эпоксидных смол и наночастиц глины. Разработанная модель позволяет делать относительно быстрые предсказания изменения модуля упругости наноматериала в зависимости от степени конверсии матрицы, объемной доли наполнителя и степени его сшивости с полимером. Построенная модель может быть использована и для других сильносшитых полимеров.

Следует отметить, что Малышев М.Д. включился в научную работу еще будучи студентом химико-технологического факультета ТвГУ в 2015г. Он принимал активное участие в грантах РФФИ и Министерства науки и высшего образования РФ. За годы научной работы Малышев М.Д. освоил передовые методы проведения моделирования молекулярных систем от момента постановки задачи до написания научных публикаций. При решении каждой из поставленных ему задач соискатель проявил большую самостоятельность. Это характеризует Малышева М.Д. как сложившегося специалиста в области физической химии, способного не только решать сформулированные ему задачи, но и самостоятельно разбираться в сложных научных проблемах. К настоящему времени он является соавтором 14 статей, входящих в перечень ВАК по профилю специальности, из них 5 работ в изданиях, индексируемых в базах данных WoS и Scopus. Также материалы работы обсуждались на 21 всероссийской и международной научной конференции.

В качестве заключения можно сказать, что по объему и уровню решенных задач, их новизне и практической значимости, диссертация Малышева М.Д. «Моделирование сетчатых молекулярных систем различной химической природы» полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым действующим «Положением о присуждении ученых степеней» к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор - Малышев Максим Дмитриевич – в полной мере заслуживает присвоения ему искомой степени по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Научный руководитель:
д.ф.-м.н., доцент
профессор кафедры Общей физики
ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

Комаров П.В.

“26” августа 2022 года