

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о диссертационной работе БАБУРКИНА Павла Олеговича «МЕЗОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ САМОСБОРКИ В ТРЕХКОМПОНЕНТНЫХ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ НАНОСИСТЕМАХ», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – физическая химия.

Проблематика диссертационной работы Бабуркина П. О. относится к одному из приоритетных направлений развития науки, технологии и техники РФ – индустрии наносистем. Развитие методов манипулирования структурой вещества на молекулярном уровне открывает поистине фантастические возможности разработки новых материалов с программируемой структурой и откликом на внешние воздействия для различных сфер применения. Одной из интересных и перспективных технологий создания наноматериалов является самосборка. Под этим термином понимается процесс, когда отдельные строительные блоки “знают”, как и каким образом должна формироваться целевая структура. При этом внешнее воздействие, которое может быть связано с изменением условий среды, является как спусковым механизмом, так и управляющим фактором. Хотя молекулярная самосборка находится в фокусе исследований уже достаточно давно, тем не менее, здесь еще много открытых вопросов, требующих своего решения. Например, развитие теоретических методов описания и прогнозирования результатов самосборки сталкивается с серьезными трудностями, поскольку требуется одновременный учет особенностей строения молекулярных структур, их взаимодействия, состава системы и многое другое. При этом каждый из параметров может иметь нетривиальное влияние. В этом случае компьютерное моделирование предоставляет широкие возможности изучения молекулярных систем с учетом практически всех перечисленных факторов. Однако и здесь есть свои трудности. Они прежде всего связаны с ограничениями, накладываемыми на размеры модели материала и временные рамки ее изучения. Таким образом, разработка новых подходов к изучению наносистем является актуальной и востребованной задачей.

В качестве предмета изучения в работе Бабуркина П. О. были выбраны три интересные супрамолекулярные наносистемы – гидрогель на основе цистеина и нитрата серебра, гетерогенный мультиблоксополимер в селективном растворителе и смесь сопряженный сополимер/неорганические наночастицы. Выбор этих систем обусловлен тем, что их структура формируется в результате процесса самосборки. Главная трудность их изучения была связана с тем, что размеры возникающих надмолекулярных организаций являются относительно “большими”, что затрудняет использование метода полноатомной молекулярной динамики, который в настоящее время является наиболее точным методом, позволяющим воспроизводить физические свойства молекулярных систем. Это послужило основным критерием выбора метода моделирования – диссипативной динамики частиц (ДДЧ). ДДЧ относится к мезомасштабным методам моделирования, с помощью которого можно изучать достаточно большие объемы вещества на относительно длительных интервалах времени. Это возможно благодаря выделению ключевых степеней свободы посредством трансформации исходной химической структуры в модельное мезомасштабное представление. Основная трудность этой процедуры – выбор стратегии округления. Можно сказать, что в настоящее время построение крупнозернистых моделей является, по сути, “искусством”.

В ходе работы над диссертацией Бабуркин П. О. сумел справиться как с поставленными перед ним задачами, так и с постоянно возникавшими трудностями. Хочется отметить следующие важные результаты. При изучении механизма гелеобразования в цистеин-серебряном растворе был разработан механизм учета влияния солей металлов (инициаторов гелеобразования). Была подтверждена принципиальная работоспособность метода формирования глобулярных надмолекулярных структур на основе сополимеров, построенных из гидрофобного затравочного блока и присоединенного к нему блока из АВ-мультиблок-сополимера. Были сформулированы две концепции получения хорошо организованных транспортных путей для носителей зарядов в смесях сопряженный полимер/квантовые точки. В целом полученные результаты носят универсальный характер и являются важным вкладом в развитие методологии компьютерного моделирования, реализуемого по схеме «химическая формула компонентов материала + композиционный состав → метод → свойства».

Таким образом, соискателем выполнен большой объем достаточно трудной работы. Это стало возможным благодаря тому, что Бабуркин П. О. начал заниматься научной работой, еще когда он был студентом третьего курса физического факультета ТвГУ. Соискатель принимал участие в ряде проектов РФФИ, РНФ и Минобрнауки. Следует отметить, что П. О. Бабуркин был руководителем гранта РФФИ, выполняемого молодыми учеными («Мой первый грант»). В настоящее время П. О. Бабуркина можно охарактеризовать как сложившегося специалиста в области физической химии, имеющего большой опыт научной работы. Все результаты диссертационной работы прошли хорошую апробацию. В общей сложности по результатам исследований опубликованы 13 научных работ (не считая тезисов докладов), из которых 11 вышли в изданиях из перечня ВАК, а 6 индексируются в международных базах данных WoS и Scopus. Результаты диссертации также обсуждались на 19 всероссийских и международных конференциях.

В качестве заключения можно сказать, что по объему и уровню выполненных исследований, их новизне и по практической значимости диссертация П. О. Бабуркина «Мезомасштабное моделирование процессов самосборки в трехкомпонентных супрамолекулярных наносистемах» полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым действующим «Положением о присуждении ученых степеней» к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор - Бабуркин Павел Олегович – в полной мере заслуживает присвоения ему искомой степени 1.4.4 – Физическая химия.

Научный руководитель:

д.ф.-м.н., доцент

профессор кафедры Общей физики *по совместительству*

ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет»

П.В. Комаров

“26” май 2022 года