

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.411.02,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 01.12.2022 г. № 7

О присуждении **Бабуркину Павлу Олеговичу**, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Мезомасштабное моделирование процессов самосборки в трехкомпонентных супрамолекулярных наносистемах» по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 13 сентября 2022 г. протокол № 5 диссертационным советом 24.2.411.02, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ; адрес: 170100, г. Тверь, ул. Желябова, 33; приказ № 105/нк от 11 апреля 2012 г.

Соискатель – Бабуркин Павел Олегович, 11 августа 1993 года рождения, в 2017 году окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет» с присвоением квалификации магистр по направлению 03.04.02 Физика; в 2021 году окончил аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» по направлению 04.06.01 Химические науки.

Работает инженером отдела радиоконтроля филиала Федерального государственного унитарного предприятия «Главный радиочастотный центр» в ЦФО, г. Тверь, Федеральной службы по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

Диссертация выполнена на кафедре физической химии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, доцент Комаров Павел Вячеславович, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет», профессор кафедры общей физики; федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт

элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук», старший научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

Криксин Юрий Анатольевич, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, федеральное государственное учреждение Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, ведущий научный сотрудник отдела № 15;

Палюлин Владимир Владимирович, кандидат физико-математических наук, автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования «Сколковский институт науки и технологий», старший преподаватель Исследовательского центра в сфере искусственного интеллекта по направлению оптимизации управленческих решений в целях снижения углеродного следа, дали **положительные отзывы** на диссертацию.

Ведущая организация - Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный технический университет», г. Тверь, в своем **положительном отзыве**, подписанном доктором химических наук Долудой Валентином Юрьевичем, профессором кафедры биотехнологии, химии и стандартизации и кандидатом химических наук Манаенковым Олегом Викторовичем, доцентом кафедры биотехнологии, химии и стандартизации и утвержденном доктором физико-математических наук, профессором Твардовским Андреем Викторовичем, ректором ТвГТУ, указала, что диссертационная работа Бабуркина П.О. представляет собой научно-квалификационную работу, которая по актуальности поставленной задачи, новизне и достоверности полученных результатов соответствует требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям (п.9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней»), утвержденное Постановлением Правительства Российской Федерации 24 сентября 2013 года № 842 (в текущей редакции)), а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что официальные оппоненты и сотрудники ведущей организации являются специалистами высокой профессиональной квалификации в области физической химии. Официальный оппонент Ю.А. Криксин является признанным специалистом в области теории и компьютерного моделирования жидких, полимерных и полиэлектролитных сред, процессов самоорганизации и самоорганизующихся нанокмполитов. Официальный оппонент В.В. Палюлин является специалистом в области стохастических методов математического моделирования, молекулярного моделирования и статистической физики макромолекул.

Соискатель имеет 33 опубликованные работы, по теме диссертации опубликовано 13 работ, в том числе 11 в журналах из Перечня рецензируемых научных изданий, включая 6 статей в журналах,

индексируемых в международных базах цитирований Scopus и WoS.

Наиболее значимые **научные работы** по теме диссертации:

1. Komarov, P.V. Moscale simulations on morphology design in conjugated polymers and inorganic nanoparticles composite for bulk heterojunction solar cell / P.V. Komarov, P.O. Baburkin, V.A. Ivanov, Y.-L. Li, S.-A. Chen, and A.R. Khokhlov // Solar RRL. – 2020. – V. 4. – I. 11.

2. Бабуркин, П.О. Управление морфологией полимерного фотоактивного слоя в фотовольтаических элементах: мезоскопическое моделирование / П.В. Комаров, П.О. Бабуркин, В.А. Иванов, Ш.А. Чен, А.Р. Хохлов. // ДАН. – 2019. – Т. 485. – №. 1. – С. 53–57

3. Komarov, P.V. Controlling the morphology of a hybrid polymer/nanoparticle active layer of solar cells: mesoscopic simulation / P.V. Komarov, P.O. Baburkin, V.A. Ivanov, S.-A. Chen, and A.R. Khokhlov // Mol. Syst. Des. Eng. – 2019. – V. 4. – P. 390-395.

4. Бабуркин, П.О. Мезоскопическое моделирование синтеза ферментоподобных катализаторов. / П.О. Бабуркин, П.В. Комаров, А.И. Барабанова, П.Г. Халатур, А.Р. Хохлов. // ДАН. – 2016. – Т. 470. – №. 2. – С. 185–188.

5. Бабуркин, П.О. Моделирование процесса гелеобразования в цистеин серебряном растворе методом диссипативной динамики частиц / П.О. Бабуркин, П.В. Комаров, С.Д. Хижняк, П.М. Пахомов // Коллоидный журнал. – 2015. – Т. 77. – №. 5. – С. 572–581.

Публикации в достаточной степени отражают содержание, новизну, практическую и теоретическую значимость диссертационного исследования.

На диссертацию и автореферат поступило 4 отзыва, все **отзывы положительные**:

1. Галицына Владимира Петровича, д.х.н., заведующего лабораторией гель-технологии химических волокон АО «Научно-исследовательский институт синтетического волокна с экспериментальным заводом». В отзыве содержатся следующие замечания: в тексте нет пояснения того, что автор подразумевает под ДДЧ-шагом; на рис. 1 первый этап получения гидрогеля на основе ЦСР обозначен как созревание геля, в то время как этот этап является созреванием раствора; на рис. 6 автореферата употребляется английское слово *regioregular*, смысл которого из рисунка и относящегося к нему текста не совсем ясен.

2. Кештова Мухамеда Лостанбиевича, д.х.н., в.н.с. лаборатории физической химии полимеров ФГБУН «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН». В отзыве содержится замечание о необходимости исследования механических свойств моделируемых фотоактивных слоев.

3. Мазо Михаила Абрамовича, к.ф.-м.н., с.н.с., ФГБУН «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН». Замечаний не содержит.

4. Книжника Андрея Александровича, к.ф.-м.н., заместителя

генерального директора ООО «Кинтех Лаб». В качестве замечания отмечено, что из текста автореферата не понятно, речь идет о качественном или количественном сравнении с имеющимися экспериментальными данными.

Диссертационный совет отмечает, что **на основании выполненных соискателем исследований:**

- **разработан** способ учета электролита в мезомасштабных моделях, что позволило воспроизвести основные фазовые состояния системы, коррелирующие с лабораторными экспериментами;
- **определены** условия синтеза мультимод-сополимеров на основе N-винилкапролактама (ВКЛ) и N-винилимидазола (ВИ), которые в условиях селективного растворителя могут формировать компактные глобулярные структуры;
- **разработаны** две концепции управления морфологией фотоактивного слоя пластиковых солнечных элементов на основе органо-неорганических нанокмозитов, состоящих из сопряженных сополимеров и неорганических наночастиц.
- для обеих концепций **определены** области параметров, при которых должны формироваться целевые наноструктуры.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что полученные в диссертационной работе результаты дополняют фундаментальные представления о механизмах гелеобразования в супрамолекулярных системах и служат теоретической проверкой принципиальной работоспособности метода формирования глобулярных надмолекулярных структур на базе гетерогенного АВ-сополимера. Предложенный в работе способ учета низкомолекулярной соли на мезомасштабном уровне расширяет функционал метода диссипативной динамики частиц.

Значение полученных соискателем **результатов исследования для практики** обусловлено тем, что сформулированы две концепции получения хорошо организованных транспортных путей для носителей зарядов в смесях сопряженный полимер/неорганические наночастицы.

Оценка достоверности результатов работы выявила: использован хорошо апробированный метод диссипативной динамики частиц, широко применяемый в настоящее время для моделирования растворов и расплавов как низко, так и высоко молекулярных соединений; проведено сравнение с экспериментальными данными.

Личный вклад соискателя заключается в самостоятельном получении всех значимых результатов исследований. Постановка задач, разработка мезомасштабных моделей исследуемых систем, планирование расчетов и обсуждение результатов проводились совместно с научным руководителем. Автор самостоятельно выполнил построение и параметризацию моделей изучаемых систем, реализовал все расчеты, произвел обработку и анализ полученных результатов. Автор также принимал участие во всех этапах написания публикаций, самостоятельно выполнил подготовку тезисов и

докладов по теме работы.

В ходе защиты диссертации были высказаны критические замечания о неудачном использовании такого термина как «фазовая диаграмма».

Соискатель Бабуркин П.О. ответил, что представленные в работе результаты описываются с использованием диаграммы состояний моделируемой системы.

Диссертация соответствует критериям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» №842 от 24.09.2013 г. в текущей редакции. На заседании 1 декабря 2022 года диссертационный совет 24.2.411.02 принял решение за разработку мезомасштабной модели цистеин серебряного раствора и учета соли (инициатора гелеобразования) в нем; моделирование синтеза и поведения цепей блокПВКЛ-ПВИ-ПВКЛ-сополимера в селективном растворителе; разработку двух концепций получения би-непрерывной сетки транспортных путей для носителей зарядов в фотоактивном слое пластиковых солнечных элементов на основе органо-неорганических нанокомпозигов, **присудить** Бабуркину П.О. ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. – физическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек (из них 6 докторов наук по специальности 1.4.4 физическая химия (физико-математические науки)), участвовавших в заседании, из 15 человек, входящих в состав совета, проголосовал: «за» – 14, «против» – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель
диссертационного совета

Орлов
Юрий Димитриевич

Ученый секретарь
диссертационного совета

Барабанова
Екатерина Владимировна

01.12.2022 г.