

«УТВЕРЖДАЮ»

Ректор ФГБОУ ВО

«Тверской государственной  
технической университет»

Д.Ф.М.Н., проф.

А.В. Гвардовский

«22» ноября 2022 г.

2022 г.

### ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственной технической университет» на диссертацию Бабуркина Павла Олеговича «Мезомасштабное моделирование процессов самосборки в трехкомпонентных супрамолекулярных наносистемах», представленную на соискание степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

На сегодняшний день компьютерное моделирование является мощным методом изучения различных явлений природы, в том числе физико-химических свойств веществ и материалов, наряду с теоретическими и экспериментальными методами. Использование компьютерного моделирования позволяет производить исследования на основе вычислительных моделей, учитывающих современные теоретические разработки. Компьютерные модели служат не только для получения детальной информации об изучаемой системе или процессе, но и являются полигоном для проверки и уточнения новых теоретических концепций. Кроме этого, компьютерное моделирование позволяет рассматривать наносистемы с точки



зрения изучения закономерностей формирования структуры для выработки рекомендаций для их дальнейшего экспериментального получения. При этом, регулируя строение молекул и, как следствие, их взаимодействие друг с другом, можно непосредственно управлять процессами самосборки. В связи с вышеизложенным, диссертационное исследование Бабуркина Павла Олеговича «Мезомасштабное моделирование процессов самосборки в трехкомпонентных супрамолекулярных наносистемах» является актуальным и находится в тренде современных исследований в области физической химии.

В рамках диссертационного исследования Бабуркиным Павлом Олеговичем решена важная научно-техническая задача компьютерного моделирования наносистем, для которых процессы самосборки играют ключевую роль, а именно: супрамолекулярного гидрогеля, мультиметалло-сополимера и органо-неорганических нанокомпозитов. Во всех случаях использовалась методология мезомасштабного моделирования. Успех выполненных исследований определил выбор адекватного метода, способного описывать поведение выбранных систем, а также разработку компьютерных моделей, учитывающих ключевые степени свободы.

В качестве научной новизны проведенного исследования необходимо отметить разработанную компьютерную модель, воспроизводящую процесс лабораторного получения гетерогенного АВ-мультиметалло-сополимера на основе N-винилкапролактама (ВКЛ) и N-винилимидазола (ВИ).

Практическая значимость работы заключается в возможности разработанных мезомасштабных компьютерных моделей смесей сопряженных сополимеров и неорганических наночастиц (НЧ), способных предсказывать структуру фотоактивного слоя полимерных солнечных батарей.

Проведенные исследования апробированы в ходе участия автора в работе пяти международных конференций. Также результаты диссертационного исследования полно представлены в одиннадцати статьях, опубликованных в научных изданиях, рекомендованных ВАК.



Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и библиографического списка, включающего 218 наименований.

Во введении осуществлена постановка проблемы, определена цель, сформулированы задачи исследования, приведена краткая характеристика работы.

В первой главе («Самоорганизация в супрамолекулярных системах») проведен глубокий анализ источников информации по рассматриваемой проблеме. Проведенный обзор доказывает необходимость комплексного подхода к компьютерному моделированию самоорганизации в супрамолекулярных системах.

Во второй главе работы («Методология моделирования») приведены основные методы и методики проводимых исследований, включая обзор методов компьютерного моделирования, методов диссипативной динамики частиц (ДДЧ), принципов построения крупнозернистых моделей, принципов параметризации крупнозернистых моделей и методов анализа внутреннего состояния модели молекулярных систем.

Третья глава «Моделирование перехода цистеин серебряного раствора в гелеобразное состояние» содержит основные результаты проведенной работы в части моделирования перехода цистеината серебра (ЦС) в водном растворе, содержащем электролит (инициатор гелеобразования), в гелеобразное состояние. В ходе выполненных работ была создана крупнозернистая модель ЦСР. В ней явно учитываются только цвиттер-ионы ЦС и вода. Частицы ЦС представлены двумя полярными (O, N) и двумя неполярными (C, Ag) ДДЧ частицами. В отсутствие инициатора гелеобразования ЦС формирует стабилизированные кластеры. Инициатор гелеобразования учитывался неявно, посредством постепенного уменьшения значений параметров растворимости Гильдебранда для ДДЧ частиц O и N. Это приводит к нарушению стабилизации кластеров ЦС, что в узком диапазоне изменения параметров растворимости влечет за собой выстраивание кластеров ЦС в нитеобразные агрегаты, наблюдаемые в реальном эксперименте, аналогично –



в узком диапазоне изменения концентрации инициатора гелеобразования. При сильном отличии параметров растворимости ДДЧ частиц О и N от частиц, моделирующих растворитель (большие концентрации электролита), кластеры ЦС агрегируют, что моделирует выпадение осадка ЦС.

Четвертая глава «Моделирование синтеза молекул блокПВКЛ-ПВИ-ПВКЛ-сополимера» содержит основные результаты проведенной работы в части моделирования АВ-мультиблок-сополимеров. На основе анализа распределения сомономеров показано, что возникающая структура короны будет не способна полностью стабилизировать возникающие глобулы на основе одиночных цепей состоящей из блоков на основе поли ВКЛ (ПВКЛ) и поли ВИ (ПВИ). Предполагалось, что короткие ПВКЛ сегменты в присоединенном ПВИ-ПВКЛ-блоке, встраиваясь в гидрофобное ядро, будут способствовать формированию гидрофильных петель из более длинных ПВИ-блоков (контактирующих с растворителем), которые и будут обеспечивать стабильность глобулы в условиях селективного растворителя.

Пятая глава «Моделирование морфологии гибридных нанокомпозитов на основе сопряженных полимеров и неорганических наночастиц» содержит основные результаты проведенной работы в части моделирования сопряженных полимеров и неорганических наночастиц. В ходе выполненных исследований впервые удалось показать, что посредством выбора типа лигандов (покрывающих поверхность неорганических полупроводниковых НЧ) и химической структуры блоков сопряженного сополимера (тип мономеров, отношение длин блоков) возможно контролировать морфологию фотоактивного слоя солнечных батарей. Также в ходе компьютерных экспериментов показано, что морфологией смеси из сопряженных полимеров и НЧ можно управлять посредством изменения типа сомономеров полимера и типа лигандов, а также весовой доли НЧ в составе смеси.

В разделе «Основные результаты и выводы диссертационной работы» приведены основные результаты работы, подчеркнута новизна и практическая значимость диссертационного исследования, определены перспективы



возможных дальнейших исследований. Результаты проделанной работы в полной мере содержатся в автореферате.

По работе имеется ряд вопросов и замечаний:

- 1) В связи с чем в качестве модельной системы был выбран раствор L-цистеина и нитрата серебра?
- 2) Можно ли использовать полученную модель для других солей или их смесей?
- 3) В работе представлено моделирование бесконечно разбавленного раствора АВ-мультиблок-сополимера на основе N-винилкапролактама (ВКЛ) и N-винилимидазола (ВИ), в связи с чем возникает вопрос о возможности применения модели для реальных растворов.
- 4) На стр. 133 автор указывает «Было установлено, что ДДЧ частицы в составе полимерных цепей образуют перколирующие кластеры во всей рассмотренной области значений параметров», хотя на рисунке 41 явно видна область макрофазного расслоения.

Указанные замечания носят дискуссионный характер, не затрагивают существа работы и основных выводов.

Полученные в диссертационной работе результаты могут быть рекомендованы для внедрения в учебной и научной деятельности Тверского государственного университета, Тверского государственного технического университета, Ивановского государственного химико-технологического университета, Института прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук, Сколковского института науки и технологий. Также результаты исследования могут быть использованы компаниями, занимающимися разработкой программного обеспечения: НИИ "Центрпрограммсистем", ГК СКБ Контур, ИнфоТеКс и т.п.

По актуальности, научной новизне и практической значимости работа соответствует требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской



Федерации 24 сентября 2013 года № 842 (в текущей редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук. Диссертация отвечает паспорту специальности 1.4.4 – Физическая химия по п. 10 «Создание и разработка методов компьютерного моделирования строения и механизмов превращений химических соединений на основе представлений квантовой механики, различных топологических и статистических методов, включая методы машинного обучения, методов молекулярной механики и молекулярной динамики, а также подходов типа структура-свойства»

Диссертант Бабуркин Павел Олегович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Диссертация рассмотрена на заседании кафедры биотехнологии, химии и стандартизации Тверского государственного технического университета 31 октября 2022 года (протокол № 3).

Профессор кафедры биотехнологии, химии и стандартизации федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный технический университет», д.х.н. (02.00.15 – Кинетика и катализ)

В.Ю. Долуда

Доцент кафедры биотехнологии, химии и стандартизации федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный технический университет», к.х.н. (02.00.04 – Физическая химия)

О.В. Манаенков

170026, г. Тверь, наб. А Никитина 22, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный технический университет», кафедра биотехнологии, химии и стандартизации, тел: +74822789317, +74822789348, e-mail: [science@science.tver.ru](mailto:science@science.tver.ru),