

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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

Диссертационная работа П.О. Бабуркина посвящена изучению процессов самосборки в супрамолекулярных системах, происходящих на наномасштабном уровне. Это актуальная проблема, тесно связанная разработкой технологий программируемого построения структуры наноматериалов по принципу “снизу-вверх”. В качестве объектов исследования автор выбрал трехкомпонентные молекулярные системы, такие как: супрамолекулярный гидрогель, получаемый путем смешивания водных растворов L-цистеина и нитрата серебра, бесконечно разбавленный раствор молекул АВ-мультиблок-сополимера на основе N-винилкапролактама и N-винилимидазола и органо-неорганические нанокомпозиты сопряженных полимеров и квантовых точек. Каждая из выбранных систем имеет высокую прикладную значимость. Первая система может быть основой гелей медицинского предназначения, вторая может служить прототипом построения синтетических ферментов, в третьем случае автор имеет дело с материалами для солнечной энергетики. В качестве основного метода изучения всех систем используется один метод моделирования – диссипативная динамика частиц.

К моей области исследований наиболее близкое отношение имеют материалы пятой главы, посвященной моделированию морфологии гибридных нанокомпозитов на основе сопряженных полимеров и неорганических наночастиц. Можно сказать, что в этой главе на основе выполненных исследований диссертанту удалось предложить рекомендации по оптимизации структуры фотоактивного слоя полимерных солнечных батарей, а именно: как можно методами молекулярной самосборки сформировать взаимопроникающие сетки транспортных путей для носителей зарядов. Следует отметить, что одна из разработанных концепций нашла свое экспериментальное подтверждение, что подтверждает высокую предсказательную силу используемой автором методологии моделирования.

У меня есть только одно замечание к содержанию автореферата. Судя по полученным автором диаграммам состояния смесей сопряженных полимеров и квантовых точек, взаимопроникающая сетка транспортных путей возникает при высокой весовой доли квантовых точек. Такие материалы должны обладать

большой хрупкостью. Поэтому дополнительно необходимо исследовать механические свойства моделируемых фотоактивных слоев.

Сделанное замечание не влияет на общее впечатление о работе П.О. Бабуркина, поскольку она является интересной научно-исследовательской работой и содержит достаточный объем новых научных данных. Полученные в диссертации результаты прошли хорошую апробацию на российских и зарубежных конференциях по профилю выполненных исследований и опубликованы в ведущих рецензируемых изданиях.

Анализ содержания автореферата, а также актуальности рассмотренных задач, научной новизны и прикладной значимости результатов позволяет заключить, что диссертация Павла Олеговича Бабуркина «Мезомасштабное моделирование процессов самосборки в трехкомпонентных супрамолекулярных наносистемах» полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям согласно критериям пп. 9-11 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. в редакции с изменениями, утвержденными постановлением Правительства Российской Федерации № 335 от 21 апреля 2016 г. и №426 от 20 марта 2021 г. Подводя итог, считаю, что автор диссертации Павел Олегович Бабуркин заслуживает присуждения ему искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Ведущий научный сотрудник лаборатории физической химии полимеров,
доктор химических наук по специальности 02.00.06 - Высокомолекулярные
соединения

КЕШТОВ Мухамед Лостанбиевич

25 октября 2022

Адрес организации: 119334, г. Москва, Вавилова 28,
ФГБУН «Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова
Российской академии наук»
Тел.: 8(499) 135-79-10
E-mail: keshtov@ineos.ac.ru