

О Т З Ы В

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 разработке методов мезомасштабного моделирования и применению этих методов для исследования процессов самосборки трех наноструктур: супрамолекулярного гидрогеля, мультблок-сополимера и фотоактивного слоя в органо-неорганических солнечных элементах.

В настоящее время компьютерное моделирование активно и успешно используется для изучения структуры и физических свойств самых разных объектов на молекулярном уровне. Хорошо разработаны как методика таких расчетов, так и соответствующее программное обеспечение. Однако моделирование на мезоскопическом уровне до сих пор сталкивается с существенными проблемами, связанными в первую очередь с выбором адекватных моделей, а также их верификации, поскольку выбор модели существенным образом зависит и от молекулярной структуры объекта исследования, и от изучаемых с помощью моделирования его свойств. В связи с этим построение и верификация моделей, которые позволяют изучать процессы структурообразования на мезоскопическом уровне, представляется весьма важной и актуальной задачей.

В работе рассмотрены три задачи, представляющих как теоретический, так и практический интерес: 1) исследование влияния низкомолекулярной соли инициатора гелеобразования на структуру цистеин серебряного раствора; 2) определение условий получения мультблок-сополимеров, способных самопроизвольно формировать компактные глобулы, и выяснение их агрегативной устойчивости; 3) разработка методов управления морфологией фотоактивного слоя пластиковых солнечных батарей на основе органо-неорганических нанокомпозитов. В последнем случае разработано два подхода к построению фотоактивного слоя: использование свойства *AB*-диблоксополимеров образовывать термодинамически устойчивые домены с различной симметрией и формирования взаимопроникающей сети транспортных путей, в результате равномерного распределения в объеме фотоактивного слоя.

Одним из достоинств работы является то, что полученные в работе П. О. Бабуркиным результаты не только имеют теоретическое значение для понимания процессов структурообразования, но и позволяют использовать их на практике для получения функциональных нанокомпозитов.

Судя по автореферату, опубликованным статьям и докладам на конференциях, диссертационная работа является актуальной, а ее результаты - новыми и достоверными. Автореферат и диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям Положения о присуждении ученых степеней, № 842 от 24 сентября 2013 г. (в текущей редакции) предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Бабуркин Павел Олегович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Старший научный сотрудник,
кандидат физико-математических наук
(специальность 01.04.19 - физика полимеров,

М.А. Мазо

19.11.2022

Адрес:

119991, г. Москва, ул. Косыгина, 4, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)

Тел.: +7 (495) 939-75-15; адрес электронной почты: mikhail.mazo1@gmail.com

Подпись к.ф.-м.н. Мазо М.А. заверяю:
Ученый секретарь ФИЦ ХФ РАН, к.ф.-м.н.

Ларичев М.Н.