

## **Отзыв**

на автореферат диссертации **Малышева Максима Дмитриевича**  
на тему «Моделирование сетчатых молекулярных систем различной химической природы,  
представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по  
специальности 1.4.4 – Физическая химия

**Актуальность направления исследования.** Изучение особенностей формирования структур молекулярных систем с сетчатой структурой, таких как спитые полимеры и супрамолекулярные гели является важным направлением в области физико-химии полимеров. Сетчатые материалы востребованы в качестве удерживающих и связующих матриц, армирующих структур, абсорбентов и др. Сложность задачи по изучению формирования таких структур связан, прежде всего, с множеством химически связанных между собой случайным образом элементов. В настоящее время отсутствуют универсальные теории, позволяющие прогнозировать взаимосвязь структуру и свойства материалов, имеющих сложное сетчатое строение. В этой связи предлагаемая к защите диссертационная работа, направленная на развитие методов компьютерного моделирования, структур материалов с сетчатой структурой., безусловно, **является актуальной.**

**Научная новизна работы.** Основные научные достижения работы состоят: в проведении молекулярно-динамического моделирования водных растворов на основе L-цистеина и нитрата серебра в рамках полноатомных моделей; в изучении структуры супрамономеров, образующихся в созревших водных растворах L-цистеина и нитрата серебра; в разработке метода анализа водных растворов на основе нитрата серебра и серосодержащих аминокислот; в выявлении в структурах спитых полимерных матриц основной роли несущих нагрузку цепей в формировании механического отклика.

**Теоретическая значимость работы.** Теоретическая значимость работы состоит в развитии методов моделирования молекулярных систем, имеющих сетчатую структуру и различную природу взаимодействия между образующими их компонентами.

**Практическая значимость работы.** Представленные результаты и разработанные подходы к моделированию сетчатых молекулярных структур с различной природой взаимодействия между образующими их компонентами позволяют прогнозировать физико-химические свойства материалов подобной структуры.

**Основными научными результатами работы можно считать:** исследование и моделирование механизма самосборки супрамолекулярных агрегатов, возникающих в водных растворах на основе нитрата серебра и L-цистеина (ЦСР); выявление механизма гелеобразования в ЦСР; проведение полноатомного моделирования и исследование растворов метилового эфира фенил-C61-масляной кислоты и фенил-C71-масляной кислоты в 1,8-октандиоле; разработку мезомасштабной модели нанокомпозита на основе высокосшитых полимерных матриц и наночастиц глины.

**По тексту автореферата возникло следующее замечание:**

Правильность используемых подходов к моделированию и предсказанию свойств рассматриваемых сетчатых молекулярных структур выглядит достаточно убедительно, но проведение в работе хотя бы небольшого объёма «собственных» экспериментальных исследований свойств изучаемых структур существенно добавила бы убедительности к выводам о взаимосвязи структуры и свойств изучаемых объектов.

**Общее заключение по содержанию автореферата** может быть следующим: диссертационная работа на тему ««Моделирование сетчатых молекулярных систем различной химической природы» представляет собой завершённое научное исследование, выполненное на достаточно высоком научном и теоретическом уровне, соответствует требованиям п.9 «Положения о присуждении ученых степеней» №842, а соискатель – Малышев Максим Дмитриевич, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия

Заведующий кафедрой инженерного материаловедения и метрологии

ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна»,

д.т.н. (специальность 05.19.01),

профессор

Екатерина Сергеевна Цобкало

*16.11.22*

Контактная информация:

ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет промышленных технологий и дизайна», адрес: 191816, Санкт-Петербург, ул. Большая Морская, д. 18; тел.: 8 (812) 315-15-74, e-mail: tsobkallo@mail.ru