

О Т З Ы В

на автореферат диссертации Малышева Максима Дмитриевича
«МОДЕЛИРОВАНИЕ СЕТЧАТЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМ РАЗЛИЧНОЙ
ХИМИЧЕСКОЙ ПРИРОДЫ», представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
1.4.4. – Физическая химия.

Диссертационная работа Малышева М.Д. посвящена изучению механизмов формирования сетчатых супрамолекулярных структур в водных растворах электролитов с серосодержащими аминокислотами и ряду других сложных объектов. **Актуальность** представленного труда обоснована необходимостью целенаправленного развития методов компьютерного моделирования, способных воспроизводить структуру и предсказывать свойства материалов с сетчатой структурой.

Целью настоящей работы развитие методологии моделирования сетчатых молекулярных систем с разными механизмами взаимодействия между образующими их компонентами для предсказания физико-химических свойств материалов на их основе в зависимости от изменения ключевых параметров. Для достижения поставленной цели были сформулированы следующие **задачи**:

- исследование механизма самосборки супрамолекулярных агрегатов, возникающих в водных растворах на основе нитрата серебра и L-цистеина, с применением полноатомного и мезомасштабного моделирования;
- разработка метода для предсказания гелеобразующих свойств водных растворов нитрата серебра с N-ацетил-L-цистеином, 3-меркаптопропионовой кислотой и цистеамином;
- исследование структурообразования в растворах производных фуллеренов 1,8-октандитиолом для выявления типа структурных упорядочений в этих системах;
- разработка мезомасштабной модели нанокompозита с учетом особенностей формы наночастиц и наличия поверхностного модификатора, способного формировать перекрестные связи с полимерной матрицей, для изучения влияния наполнителей на свойства нанокompозитов;
- исследование механизма механического отклика в нанокompозитах на основе сильно сшитых полимерных матриц, наполненных наночастицами.

Тщательный анализ текста автореферата убедительно показывает, что цель работы **достигнута**, а сопутствующие ей задачи полностью **выполнены**. Действительно, автором диссертации впервые разработана мезомасштабная

модель, которая качественно воспроизводит все особенности структурообразования в растворах L-цистеина и нитрата серебра в зависимости от концентрации электролита. Основные результаты исследования опубликованы в 14 научных публикациях в рецензируемых отечественных и международных журналах и были представлены на конференциях различного уровня.

Принципиальных недостатков в автореферате не обнаружено.

Рекомендация: по моему мнению, представленный подход стоит распространить на другие важные объекты т.н. «soft matter», прежде всего, супрамолекулярные гели и металлогели, так как в этой области, несмотря на обильное математическое описание (см., например, *Molecular Gels*. Ed. R. G. Weiss and P. Terech, Springer, 2006), отсутствуют простые и понятные химиками-синтетикам рекомендации – при каких условиях какие молекулы способны образовывать подобные супрамолекулярные архитектуры.

Таким образом, считаю, что по объему, актуальности, научной и практической значимости диссертационная работа «Моделирование сетчатых молекулярных систем различной химической природы» соответствует всем требованиям «Положения о порядке присуждения учёных степеней» (утверждено Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842, в действующей редакции), а её автор, Малышев Максим Дмитриевич, заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4. – Физическая химия.

Заведующий лабораторией супрамолекулярной химии (№2),
ФГБУН «Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН»,
доктор химических наук, профессор

Вацадзе Сергей Зурабович

16 ноября 2022 г.

Почтовый адрес: 119991, Россия, г. Москва, Ленинский пр-т, д. 47
Телефон: +7 (499) 137-29-44. Адрес электронной почты: vatsadze@ioc.ac.ru
ИОХ РАН

Подпись Вацадзе С.З. заверяю:
Ученый секретарь ИОХ РАН

К.Х.Н.

И.К. Коршевец