

О Т З Ы В

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.

Необходимость создания новых материалов с улучшенными свойствами для электроники, медицины и многих других направлений развития цивилизации требует разработки теорий, позволяющих добиваться получения требуемых характеристик путем выбора исходных компонентов и условий. Многие современные материалы имеют сетчатую супрамолекулярную структуру, формируемую ковалентными связями либо нековалентными взаимодействиями, поэтому выбор темы и цели работы по своей актуальности не вызывает сомнений.

На примере нескольких различных систем (производные фуллеренов в высококипящем растворителе, комплексы серебра с биогенными серосодержащими соединениями, нанокомпозиты на основе эпоксидных смол) показана эффективность и универсальность примененного методологического подхода на основе теории функционала плотности, методов молекулярной динамики и диссипативной динамики частиц, позволившего впервые решить задачи по выявлению структуры и размерных характеристик молекулярных сеток, необходимых условий гелеобразования, повышения упругих свойств указанных объектов. Полученные результаты могут быть применены на практике в работах по созданию новых перспективных материалов с использованием данных или аналогичных систем, имеющих сетчатую структуру.

Работа прошла апробацию на международных и всероссийских конференциях и представляет целостное, спланированное исследование, результаты которого опубликованы в большом числе статей в журналах, рекомендованных ВАК.

По тексту авторефера возникли следующие вопросы:

1. Имеются ли экспериментальные данные, позволяющие подтвердить полученные в настоящей работе расчетными методами результаты (размерные характеристики кластеров; пространственная конфигурация сетчатых структур; взаимосвязь напряжения и деформации)?
2. Для производных фуллеренов - метиловых эфиров фенил- C_{61} -масляной кислоты и фенил- C_{71} -масляной кислоты было бы целесообразно привести наименования в соответствии с номенклатурой IUPAC.

Данные вопросы не уменьшают ценности представленного исследования.

Работа представляет собой завершенное исследование, которое соответствует требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (утверждено Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 №842, редакция от 26.09.2022 г.), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Малышев Максим Дмитриевич заслуживает

присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

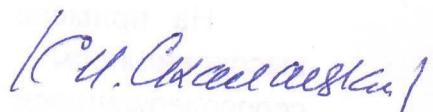
25 ноября 2022 г.

научный сотрудник лаборатории химии антиоксидантов
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
«Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля
Российской академии наук»,
кандидат химических наук
Волков Владимир Анатольевич

Личную подпись сотрудника ИБХФ РАН В.А. Волкова заверяю:

Ученый секретарь ИБХФ РАН, к.б.н.


С.И. Скалацкая



119334, г. Москва, ул. Косыгина, д.4

ФГБУН «Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской академии наук»
тел: +7(499)135-7894, факс: +7(499)137-4101, e-mail: ibcp@sky.chph.ras.ru