

## ОТЗЫВ

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

Представленная работа посвящена развитию методов компьютерного моделирования молекулярных систем с сетчатой структурой (супраполимеры и высокомолекулярные соединения) и их применению (I) для исследования процессов самоорганизации в водных растворах на основе серосодержащих соединений и растворов модифицированных фуллеренов в органических растворителях; а также (II) взаимосвязи структуры полимерной матрицы с механическими свойствами органо-неорганического нанокомпозита. Рассмотренные классы материалов востребованы для широкого спектра применений, при этом их свойства определяются во многом именно структурой материала. Поэтому детальное понимание механизмов формирования сетчатых структур, как и их реакции на внешние воздействия, имеет высокую степень важности как с фундаментальной точки зрения, так и для практических применений. В частности, это важно для предсказания структурных и физико-химических свойств новых наноматериалов. Современные методы компьютерного моделирования являются эффективным инструментом для проведения подобных исследований, а их развитие является **важной задачей**. По этой причине диссертационная работа Малышева М. Д. **является актуальной**.

Среди основных результатов представленной работы можно выделить следующие:

- (1) Многомасштабную модель структурообразования в растворах L-цистеина и нитрата серебра качественно объясняющую все структурные переходы в этой системе в зависимости от содержания электролита;
- (2) Крупномасштабную молекулярно динамическую (МД) модель растворов модифицированных фуллеренов PC<sub>61</sub>BM и PC<sub>71</sub>BM в 1,8-октандиоле, демонстрирующую формирование трехмерных биконтигуальных сетчатых структур из фуллеренов;
- (3) Мезомасштабную модель нанокомпозита на основе метода диссипативной динамики частиц (ДДЧ) нацеленную на предсказания основных трендов изменения механических свойств высокосшитых полимерных матриц и наночастиц глины.

Разработанные модели позволяют качественно объяснить имеющиеся экспериментальные данные для выбранных молекулярных систем, что говорит о высоком уровне проведенного теоретического исследования и достоверности предложенных методик на основе методов компьютерного моделирования. Это позволяет заключить, что диссертация Малышева М.Д. является целостной и законченной работой, а полученные результаты имеют высокую теоретическую и практическую значимость.

К недостаткам автореферата можно отнести следующее: в тексте никак не описаны основные параметры проведенного моделирования, например, выбор потенциалов межмолекулярного взаимодействия для молекулярно-динамического моделирования, параметры для метода ДДЧ и т.д., и основные аргументы, на основе которых были выбраны именно использованные параметры.

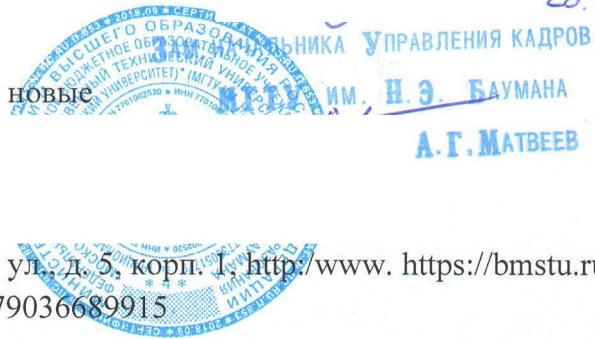
В целом, несмотря на упомянутое выше замечание, сформулированные в автореферате положения и выводы, выносимые на защиту, представляются достоверными и в достаточной степени освещены в опубликованных работах в изданиях из перечня ВАК, и входящих в международные базы цитирования WoS/Scopus. Диссертационная работа Малышева Максима Дмитриевича «Моделирование сетчатых молекулярных систем различной химической природы» полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям согласно «Положению 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. На основе вышесказанного считаю, что автор диссертации, Малышев Максим Дмитриевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.4 – Физическая химия.

Кандидат физико-математических наук по специальности 01.04.17 – Химическая физика, горение и взрыв, физика экстремальных состояний вещества

Старший преподаватель Отдела  
«Образовательный центр» Центра НТИ  
«Цифровое материаловедение: новые  
материалы и вещества»  
МГТУ им. Н.Э. Баумана

Синица Александр Сергеевич

28.11.2022



Адрес: 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, корп. 1, <http://www.bmstu.ru/>,  
E-mail: alexsinitsa91@gmail.com, тел. +79036689915