

ОТЗЫВ официального оппонента на диссертацию
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
Портнова Ивана Владимировича
на тему: «Влияние электростатических взаимодействий на самосборку и
адсорбцию линейных цепей и микрогелей.»
по специальности 02.00.06 – «высокомолекулярные соединения»

Полиэлектролиты -большой класс полимерных систем, находящихся широкое практическое применение в различных областях. Несмотря на огромную научную литературу ,целый ряд проблем остается не до конца решенным. Диссертация И.В. Портнова посвящена решению некоторых таких задач, в частности, агрегации полиэлектролитов в плохом растворителе, адсорбции полиэлектролитной цепи на заряженную плоскость , взаимодействию полиамфолитных гелей с заряженными белками. Эти задачи в значительной степени инициированы экспериментальными исследованиями, что определяет **актуальность и практическую значимость** работы

Диссертация состоит из введения, четырех глав, основных выводов, списка опубликованных работ и библиографического списка использованной литературы.

Первая глава содержит обзор литературы. Также приводятся некоторые теоретические выкладки, которые , правда, не используются в дальнейшем тексте диссертации. Обзор дает представление о том, что было известно ранее, и позволяет оценить место работы среди других работ по выбранной тематике.

Следует ,однако, отметить ряд недостатков в изложении.

1.противоположно заряженных ионов (противоионов), **мобильность** которых определяется их валентностью .(стр.4) Это не совсем так.

Мобильность определяется коэффициентом трения.

2.Для электростатического блока используются два обозначения ξ_{el} на стр.18 и D_e на стр.30

3.Неудачные фразы:

"Хотя такой подход зачастую показывал только качественные сравнения"

"Было показано, что режим, в котором наблюдается ожерельеподобная структура **весьма ограничен**" (В каком смысле?)

Во **второй** главе представлены результаты моделирования раствора линейных полиэлектролитов в плохом растворителе.

Сначала описаны метод моделирования и модель цепи. Автор пишет, что используется метод молекулярной динамики. Это не совсем точно. На самом деле используется метод стохастической динамики с учетом инерциального члена, поскольку растворитель задается неявно через силу трения и случайную силу. Поскольку система содержит заряды, должно проводиться суммирование по Эвальду. О суммировании по Эвальду сказано только в четвертой главе. Означает ли это, что в остальных главах это суммирование не проводится?

Для калибровки параметра взаимодействия ϵLJ , в потенциале Леннарда-Джонса автор предваряет расчеты моделированием одиночной цепи.

Далее проведено моделирование процесса агрегации в растворе ПЭ цепей при вариации параметра качества растворителя и степени ионизации. С ростом степени ионизации агрегаты уменьшаются и в конце концов раствор представляет собой систему вытянутых одиночных цепей.

Показано, что доля конденсированных контрионов растет только до определенной степени ионизации, а в дальнейшем остается практически постоянной. Составлена матрица, показывающая, какие кластеры возникают для разных пар значений параметров. Такая матрица может быть полезна в экспериментальных исследованиях растворов полиэлектролитов для определения областей существования различных режимов. Интерес представляет появление цилиндрических кластеров. Следует отметить, что все результаты получены при одной концентрации раствора. Вопрос автору; как изменение концентрации повлияет на выводы автора?

Автор пишет, что результаты моделирования подтверждаются экспериментально. В качестве эксперимента используются результаты

исследования агрегации молекул хитозана в сверхкритическом растворе углекислого газа, указывающие на образование цилиндрических агрегатов. По-видимому именно появление таких агрегатов и рассматривается как согласие моделирования с экспериментом.

Неудачная фраза : "используются различные **составы** ? для уменьшения адсорбции кальция на поверхности клапана" (стр.57)

Третья глава посвящена моделированию адсорбции заряженной цепи в хорошем растворителе на противоположно заряженную плоскость. Название главы не совсем соответствует ее содержанию, поскольку рассматривается не только адсорбция на плоскость, но и образование комплекса с аналогичной, но противоположно заряженной цепью. Варьируется степень ионизации цепи и концентрация низкомолекулярной соли.

Результаты моделирования двух систем сравниваются между собой. Сопоставляются пороговые концентрации соли, при которых происходит диссоциация комплекса и десорбция цепи.

Важный результат этого раздела : пороговая концентрация для комплекса ниже, чем для адсорбированной цепи. Автор дает интерпретацию этого различия. Следует отметить, что в этой интерпретации подвижность зарядов на поверхности никак не учитывается. Однако автор в говорит об "исследовании влияния подвижности зарядов на плоской поверхности на адсорбцию" (стр.6) противоположно заряженной линейной цепи. Но случай фиксированных зарядов в диссертации не рассматривается..

В четвертой главе приведены результаты моделирования взаимодействий, полиамфолитных микрогелей с заряженными молекулами белков. Автор использует упрощенные модели микрогеля и белка, учитывающие однако наиболее важные структурные характеристики.

Сопоставлены процессы захвата и высвобождения белковых молекул при изменении pH. для двух типов распределения заряженных групп в геле : статистическим и соответствующим модели ядро- оболочка. Наиболее интересным представляется вывод, что в гелях второго типа часть белков остается в геле даже при нейтральном ядре и одинаковых знаках зарядов в оболочке и в белках. Этот вывод объясняется возникновением потенциального барьера, формируемого одноименно заряженной оболочкой.

вышеуказанные недостатки, Однако, не влияют на положительную, в целом, оценку диссертации **Портнова И. В.** которая представляет собой

законченную научно-квалификационную работу. В работе получен ряд новых и важных результатов о механизмах образования и структуре ряда систем, образованных в результате баланса ван-дер-Ваальсовых и электростатических взаимодействий.

Достоверность полученных результатов определяется высоким методическим уровнем работы и их соответствием существующим теоретическим представлениям и экспериментальным данным. Основные результаты отражены в публикациях в высокорейтинговых журналах и были представлены на целом ряде престижных международных научных конференций.

Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 02.00.06 – «высокомолекулярные соединения» (по физико-математическим наукам), удовлетворяет критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова, а также оформлена согласно п. 3.1 этого Положения. Автореферат правильно отражает содержание диссертации. Соискатель Портнов Иван Владимирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.06 – «высокомолекулярные соединения»

Официальный оппонент:

доктор физ-мат. наук,

главный научный сотрудник лаборатории теории и моделирования полимерных систем,

«Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук »

Даринский Анатолий Анатольевич

подпись

20.08.2021

Дата подписания

Контактные данные:

тел.: 7(911)2809517, e-mail: a.darinskii@mail.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом
защищена диссертация:

02.00.06 – «высокомолекулярные соединения»

Адрес места работы:

199004 г. Санкт-Петербург, ул. Большой пр. В.О., д.31,

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
высокомолекулярных соединений Российской академии наук, лаборатория
теории и моделирования полимерных систем,

Тел.: 8 (812) 323-74-07 ; e-mail: imc@hq.macro.ru, факс:(812)3286869

Подпись сотрудника Федерального государственного
бюджетного учреждения науки Институт высокомолекулярных соединений
Российской акад
руководитель/кад

Начальник от
кадров ИВС Р