

В диссертационный совет 24.2.312.01,
созданный на базе ФГБОУ ВО «КНИТУ»

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Балдинова Андрея Андреевича на тему «Адгезионное взаимодействие термопластичных полимеров с поверхностью алюминия: интерпретация с позиций квантовой химии и молекулярной динамики», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия

Разработка конструкционных материалов, обладающих одновременно низкой плотностью, высокой механической прочностью и устойчивостью к коррозионному воздействию агрессивных сред крайне востребована в авиационной, космической и автомобильной промышленности. Одним из перспективных направлений по разработке материалов с вышеописанными свойствами является защита металлических конструкций с использованием полимерных покрытий. В рамках данного подхода в качестве основы часто рассматривают алюминий и сплавы на его основе ввиду высокой удельной прочности и низкой плотности. При разработке эффективной связки металлическая основа/полимерное покрытие крайне важен учет адгезионного взаимодействия. Экспериментальные исследования адгезионного взаимодействия носят макроскопический и разрушающий характер и не позволяют детально описать процессы, происходящие на молекулярном уровне. В этой связи возникает потребность в разработке подходов к исследованию на основе теоретических методов, в частности, методов квантовой химии и молекулярной динамики, которые могли бы существенно облегчить и ускорить

анализ взаимодействия металл-полимер фактически без привлечения экспериментальных стендовых испытаний. К сожалению, на сегодняшний день существует лишь ограниченное количество работ, в которых теоретический подход играл бы ведущую роль. В этой связи актуальность темы диссертации, а также практическая значимость и новизна не вызывают сомнений.

Рецензируемая диссертация построена традиционным способом, состоит из введения, литературно-аналитического обзора (Глава 1), методов исследования (Глава 2), обсуждения результатов (Главы 3 и 4), заключения, списка литературы. Диссертация изложена на 145 страницах, содержит 46 рисунков и 12 таблиц, состоит из введения, четырех глав, заключения и списка источников, включающего 127 наименований.

Введение широко охватывает современные подходы к анализу механизмов адгезионного взаимодействия. Обосновывается необходимость в применении таких теоретических подходов, как квантово-химические расчеты и молекулярная динамика. Актуализируется системное молекулярное описание механизма адгезионного взаимодействия.

Во второй главе «Методы исследования» изложены применяемые для изучения взаимодействия полимеров с поверхностью алюминия квантово-химические методы и процедуры (NBO, AIM, DOS, PDOS, PIEDA), детально представлено описание моделирование методами молекулярной динамики. Что крайне важно, в работе также были использованы экспериментальные методы для верификации результатов моделирования.

В третьей главе «Адгезионные взаимодействия адгезивов с алюминием с позиций квантовой химии» изложены представления о механизме адгезионного взаимодействия полиэтилентерефталата (ПЭТФ), полипропиленкарбоната (ППК), полиметилметакрилата (ПММА), полистирола (ПС) и полипропилена (ПП) с поверхностью алюминия, сформированные на основе комплексного

теоретического анализа с использованием методов теории функционала плотности (B3LYP, PBE), а также подходов AIM, NBO, PDOS и PIEDA. Выявлены активные центры, количественные вклады различных типов взаимодействий, а также установлены ряды прочности адгезионного взаимодействия.

В четвертой главе «Адгезионные взаимодействия адгезивов с алюминием с позиций молекулярной динамики» построены функции радиального распределения различных групп атомов в рамках взаимодействия ПЭТФ, ППК, ПММА, ПС и ПП с окисленной ($\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$) и гидроксидированной ($\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-OH}$) поверхностями алюминия. Установлено, что взаимодействие реализуется посредством образования связей между карбонильным и эфирным атомами кислорода (для кислородсодержащих полимеров), атомами углерода бензольного кольца (для ПС) и атомами алюминия субстрата, а также за счет водородных связей между атомами водорода адгезивов и атомами кислорода поверхности.

Заключение представлено 3 выводами, сформулированными на основе результатов квантово-химических расчетов (1,2), а также молекулярной динамики (3). Выводы полностью соответствуют изложенному материалу в главах 3 и 4, и являются научно обоснованными в рамках применяемых моделей и методов.

По работе имеются следующие замечания:

1. В диссертации не представлено обоснование выбора квантово-химических методов (функционал и базисный набор).
2. В диссертации также отсутствуют данные, с какой мультиплетностью проводили квантово-химические расчеты и, соответственно, какую волновую функцию использовали (для открытых или закрытых электронных оболочек)?

3. Если мультиплетность основного состояния не равна 1, то контролировали ли спиновое загрязнение, и на каких атомах в составе моделируемых кластеров неспаренный(ые) электроны могут быть локализованы?
4. Насколько существенно влияет на анализируемые параметры (например, энергии ВЗМО и НСМО) изменение мультиплетности системы?
5. В диссертации приведены результаты расчетов энергии адгезионного взаимодействия (Таблицы 5 и 7). Какая ошибка суперпозиции базисных наборов зафиксирована?
6. В диссертации (Таблица 12) и автореферате (Таблица 5) приведены энергетические характеристики систем адгезив-субстрат: эксперимент и расчет. Чем объясняется столь существенная разница между экспериментом и расчетом? Насколько молекулярная динамика может ввиду этой разницы отражать реальный тренд по взаимодействию?

Указанные замечания, однако, носят преимущественно дискуссионный характер, не затрагивают принципиальных положений работы и не снижают ее высокую научную ценность и практическую значимость.

В целом на основании изучения диссертации, автореферата и работ, опубликованных Балдиновым Андреем Андреевичем в печати по теме диссертации, можно сделать следующие выводы:

- тема диссертации является актуальной;
- научные положения, выводы и рекомендации, сформулированные в диссертации, теоретически обоснованы и достоверны;
- содержание опубликованных работ соискателя (включая статьи в рецензируемых научных изданиях из перечня ВАК) и диссертации полностью и адекватно отражает основные положения диссертации;
- автореферат соответствует материалу, представленному в диссертации.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании вышеизложенного диссертационная работа Балдинова Андрея Андреевича на тему «Адгезионное взаимодействие термопластичных полимеров с поверхностью алюминия: интерпретация с позиций квантовой химии и молекулярной динамики» является самостоятельно выполненным, законченным научно-квалификационным исследованием, в котором устанавливаются закономерности адгезионного взаимодействия между термопластичными полимерами (полиэтилентерефталатом, полипропиленкарбонатом, полиметилметакрилатом, полистиролом, полипропиленом) и поверхностью алюминия с позиций квантовой химии и молекулярной динамики. Решение этой задачи физической химии важно для разработки подходов к исследованию на основе теоретических методов для быстрого и эффективного анализа взаимодействия металл-полимер без привлечения экспериментальных стендовых испытаний.

Диссертационное исследование Балдинова А.А. соответствует паспорту специальности 1.4.4. Физическая химия по следующим пунктам:

- п.1. Экспериментально-теоретическое определение энергетических структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных и соединений, а также их спектральных характеристик;
- п. 11. Получение методами квантовой химии и компьютерного моделирования данных об электронной структуре, поверхностях потенциальной и свободной энергии, реакционной способности и динамике превращений химических соединений, находящихся в различном окружении, в том числе в кластерах, клатратах, твердых и жидкокристаллических матрицах, в полостях конденсированных среды и белковом окружении.

По объему и качеству выполненных исследований, новизне и практической значимости работа полностью соответствует требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней» ВАК Минобрнауки России, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, Балдинов Андрей Андреевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Официальный оппонент:

кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории химической физики, Уфимского института химии – обособленного структурного подразделения Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (УфИХ УФИЦ РАН)

Овчинников Михаил Юрьевич

Почтовый адрес организации: Россия, 450054, г. Уфа, Проспект Октября, 71

Телефон: +7 (347) 235-55-60

E-mail: chemorg@anrb.ru

А.О.С. 09.06.2026

ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ:

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ УФИХ РАН

К. Х. Н. *В.А.* В.А. ВЫДРИНА



Вход. № 05-9044
« 15 » 06 2026 г.
подпись *С.И.*