

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Балдинова Андрея Андреевича «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

Диссертационная работа Балдинова А.А. посвящена решению фундаментальной задачи физической химии – установлению на молекулярном уровне причин различий в прочности адгезионного взаимодействия термопластичных полимеров и алюминия. Актуальность исследования не вызывает сомнений, поскольку современные авиационная, автомобильная и химическая отрасли нуждаются в научно обоснованном подборе полимерных покрытий для алюминиевых конструкций. Автор справедливо отмечает, что экспериментальные методы (отрыв, сдвиг) не позволяют детализировать механизм взаимодействия на атомном уровне и предлагает теоретический подход: сначала моделирование методами квантовой химии с атомом алюминия, затем моделирование с окисленной и гидроксильной поверхностями алюминия и, наконец, моделирование методами молекулярной динамики. Научная новизна работы имеет несколько аспектов. Во-первых, впервые систематически с точки зрения адгезионного взаимодействия с алюминием сопоставлены пять полимеров, различающихся по набору функциональных и характеристических групп, в рамках единой методологии. Во-вторых, получены количественные данные о вкладах разных типов взаимодействий в общую энергию адгезионного взаимодействия, причем показано, что гидроксильное покрытие поверхности алюминия меняет доминирующий механизм с донорно-акцепторного на дисперсионный. В-третьих, впервые применен потенциал Морзе для расчета сил адгезионного взаимодействия адгезива и субстрата, что дает дополнительную, независимую характеристику прочности адгезионного взаимодействия. Практическая значимость работы заключается в возможности использования установленных рядов прочности адгезионного взаимодействия для обоснованного выбора полимерного покрытия для алюминия. Предложенная методология может быть распространена на другие системы полимер-металл.

По автореферату диссертации имеются следующие замечания:

1. В автореферате не приведены критерии достижения равновесия при моделировании методами молекулярной динамики моделей адгезивов и не указано время уравнивания.

2. При анализе функций радиального распределения не приведены координационные числа связей, что не позволяет количественно сравнить вклады различных типов связей в образование систем адгезив-субстрат.

Замечания не снижают научной значимости работы.

Диссертационная работа соответствует п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции). Автор диссертационной работы, Балдинов Андрей Андреевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Доктор химических наук (специальность 1.4.4. Физическая химия), Директор Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, главный научный сотрудник лаборатории математической химии ИНК УФИЦ РАН

Сабиров Денис Шамилевич

Дата « 08 » 06 2026 г.

Даю согласие на обработку персональных данных.

  
К.Х.Н. ПАВЛОВА И.Н.

Институт нефтехимии и катализа – обособленное структурное подразделение федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (ИНК УФИЦ РАН). Почтовый адрес: 450075, Республика Башкортостан, г. Уфа, проспект Октября, 141. Тел.: +7 (347) 284-27-50. E-mail: ink@anrb.ru, sabirovdsh@mail.ru.

Вход. № 05 - 3030  
« 10 » 06 2026 г.  
подпись