

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**

В диссертации Балдинова А.А. с позиций квантовой химии и молекулярной динамики рассмотрено адгезионное взаимодействие пяти термопластичных полимеров (полиэтилентерефталата, полипропиленкарбоната, полиметилметакрилата, полистирола и полипропилена) с поверхностью алюминия (окисленной или гидроксидированной). В диссертационной работе были поставлены и решены следующие задачи: 1) определение активных центров адгезионного взаимодействия термопластичных полимеров при взаимодействии с атомом алюминия методом теории функционала плотности; 2) определение механизма и энергетических характеристик адгезионного взаимодействия термопластичных полимеров с окисленной и гидроксидированной поверхностями алюминия методом теории функционала плотности; 3) моделирование методами молекулярной динамики адгезионного взаимодействия термопластичных полимеров с окисленной и гидроксидированной поверхностями алюминия для определения адгезионной прочности и механизма адгезионного взаимодействия. Результаты решения этих задач новы и несут в себе практическую значимость для проектирования антикоррозионных полимерных покрытий и для гетерогенного катализа в области закрепления каталитически активных металлов через полимерные лиганды на оксид алюминия как носитель.

Результаты работы отражены в трех статьях в рецензируемых изданиях, рекомендованных ВАК Минобрнауки для размещения материалов диссертаций, и в девяти публикациях в сборниках материалов конференций.

Отметим замечания.

1. В автореферате не указана величина вакуумного слоя при моделировании методом PBE-GD3/MOLOPT.

2. Не понятно, проводилась ли операция отжига для снятия внутренних напряжений в начальных конфигурациях аморфных ячеек полимеров.

3. Из автореферата не ясно, как осуществлялась параметризация межфазного взаимодействия в силовом поле IFF для атомов полимера и

атомов гидроксильной поверхности – использовались комбинированные правила Лоренца-Бертло или иные подходы?

По своей актуальности, научной новизне, теоретической и практической значимости диссертационная работа Балдинова Андрея Андреевича отвечает требованиям, которые установлены п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Составитель отзыва:

доктор химических наук, доцент,
заведующий кафедрой физической и коллоидной химии
ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет»

ШЛЫКОВ Сергей Александрович



15 июня 2026 года

Контактные данные:

Тел.: +7(905)1095974, e-mail: shlykov@isuct.ru

Специальность, по которой составителем отзыва защищена диссертация:
02.00.04 – физическая химия

Адрес места работы:

153000, город Иваново, Шереметевский проспект, д. 10.
ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет», кафедра физической и коллоидной химии
Тел.: +7 (4932) 329241; e-mail: rector@isuct.ru

Подпись Шлыков С.А. удостоверяю
Ученый секретарь ИГХТУ Лиса

Вход. № 95-9092
« 25 » 06 2026 г.
подпись Ряев