

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. решает важную физико-химическую задачу – установление связи между химическим строением термопластичных полимеров и прочностью их адгезионного взаимодействия с поверхностью алюминия. При этом используются два вычислительных подхода: квантовая химия и молекулярная динамика. Рассмотрены пять термопластов: полиэтилентерефталат, полипропиленкарбонат, полиметилметакрилат, полистирол и полипропилен, – и два варианта представления поверхности алюминия: окисленная и гидроксिलированная. Установленные механизмы адгезионного взаимодействия определяют научную новизну работы. Практическая значимость работы состоит в том, что выявленные причины прочности адгезионного взаимодействия систем полимер-алюминий могут служить научным фундаментом при разработке мероприятий по антикоррозионной защите алюминиевых изделий.

Наряду с положительными сторонами работы, в качестве замечаний необходимо отметить следующее.

1. В автореферате не указано, учитывалась ли при квантово-химическом моделировании релаксация атомов окисленной поверхности алюминия при взаимодействии с полимером.

2. В молекулярно-динамическом моделировании не указан тип использованного термостата (например, Нозе-Гувера, Берендсена, Ланжевена).

Указанные замечания не снижают очевидных достоинств выполненного исследования.

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

Заведующий лабораторией гетероцепных полимеров (№ 302) ИНЭОС РАН,
доктор химических наук (1.4.7. (02.00.06) Высокомолекулярные соединения),
доцент (1.4.7. (02.00.06) Высокомолекулярные соединения)

Межуев Ярослав Олегович

Даю согласие на обработку персональных данных.

Ведущий научный сотрудник
лаборатории стереохимии
сорбционных процессов (№ 314)

ИНЭОС РАН, доктор химических наук

(1.4.4. (02.00.04) Физическая химия, 1.4.3. (02.00.03) Органическая химия),

Ирина Анатольевна Хотина

Даю согласие на обработку персональных данных.

Дата « 25 » июня 2026 г.

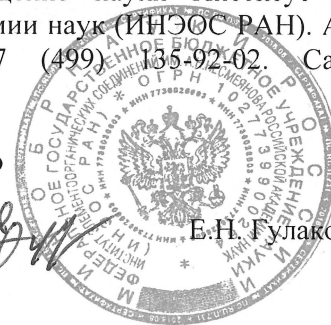
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук (ИНЭОС РАН). Адрес: 119334, Москва, ул. Вавилова, д. 28, стр. 1. Телефон: +7 (499) 135-92-02. Сайт: <https://ineos.ac.ru>. E-mail: larina@ineos.ac.ru

Подписи Я.О. Межуева и И.А. Хотинной удостоверяю

Ученый секретарь ИНЭОС РАН, к.х.н.



Е.Н. Гулакова



Вход. № 05-9097

« 01 » 07 2026 г.
подпись 