

Заключение диссертационного совета 24.2.312.01, созданного
на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический
университет», Министерство науки и высшего образования Российской Федерации,
по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук
аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 02.07.2026 г. № 9

О присуждении Балдинову Андрею Андреевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата химических наук.

Диссертация «Адгезионное взаимодействие термопластичных полимеров с поверхностью алюминия: интерпретация с позиций квантовой химии и молекулярной динамики» по специальности 1.4.4. Физическая химия принята к защите 28.04.2026 г. (протокол заседания № 5) диссертационным советом 24.2.312.01, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет» (ФГБОУ ВО «КНИТУ»), Министерство науки и высшего образования Российской Федерации, 420015, г. Казань, ул. К. Маркса, 68; совет утвержден приказом Рособнадзора от 18.01.2008 г. № 1–50 (приказом Минобрнауки России № 714/нк от 02.11.2012 г. диссертационный совет 24.2.312.01, созданный на базе ФГБОУ ВО «КНИТУ», признан соответствующим действующим требованиям «Положения о совете...», приказом Минобрнауки России № 561/нк от 03.06.2021 г. диссертационному совету 24.2.312.01 установлены полномочия по защитах диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук на срок действия номенклатуры научных специальностей).

Соискатель Балдинов Андрей Андреевич, 30.12.1999 года рождения, в 2024 г. окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет». С 01.10.2024 по настоящее время Балдинов Андрей Андреевич является аспирантом очной формы обучения ФГБОУ ВО «КНИТУ». Работает в должности ассистента кафедры общей химической технологии ФГБОУ ВО «КНИТУ», Минобрнауки России.

Диссертация выполнена на кафедре общей химической технологии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», Минобрнауки России.

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор Улитин Николай Викторович, федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский национальный исследовательский технологический университет», кафедра общей химической технологии, заведующий кафедрой.

Официальные оппоненты:

– **Седов Игорь Алексеевич**, доктор химических наук, доцент, федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», Химический институт им. А.М. Бутлерова, ведущий научный сотрудник;

– **Овчинников Михаил Юрьевич**, кандидат химических наук, Уфимский Институт химии – обособленное структурное подразделение Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук, лаборатория химической физики, старший научный сотрудник,

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН), в своем положительном отзыве, подписанном ведущим научным сотрудником ФИЦ ХФ РАН, доктором физико-математических наук Баженовым Сергеем Леонидовичем, указала, что полученные автором диссертации результаты значимы для развития физической химии межфазных взаимодействий. Они могут быть востребованы в гетерогенном катализе при разработке полимерных лигандов, служащих для закрепления активных центров на поверхности оксида алюминия как носителя. Результаты и выводы представляют интерес для организаций, занимающихся экспериментальными и теоретическими исследованиями адгезии в различных системах и применением полимерных покрытий как антикоррозионной защиты трубопроводов и технологического оборудования, а также могут использоваться в базовых университетских курсах по физической химии, квантовой химии и молекулярной динамике. Диссертация Балдинова А.А. является завершенным научно-квалификационным исследованием, в котором решена задача выявления закономерностей адгезионного взаимодействия ряда промышленно значимых термопластичных полимеров, имеющих в своем составе различные функциональные и характеристические группы, с окисленной и гидроксильной поверхностями алюминия. Результаты работы соответствуют пп. 1 и 11 паспорта специальности 1.4.4. Физическая химия. Автореферат и публикации полностью отражают содержание диссертации. Диссертационная работа соответствует

требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 г. (в действующей редакции). Балдинов Андрей Андреевич заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

Соискатель имеет 26 опубликованных работ, из них по теме диссертации – 12, в том числе 3 статьи (объемом 36 страниц) в журналах, входящих в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий по группе научных специальностей 1.4. Химические науки, 9 тезисов докладов на конференциях различного уровня. Авторский вклад соискателя составляет около 83 %.

Наиболее значимые работы соискателя:

1. Ulitin, N.V. Acid-base properties and modeling by quantum chemistry of adhesion interactions at the interface of thermoplastic-aluminum systems / N.V. Ulitin, V.I. Anisimova, **A.A. Baldinov**, I.A. Suvorova, D.A. Shiyan, K.A. Tereshchenko, I.A. Starostina, S.L. Khursan, Y.O. Mezhuev, K.E. Kharlampidi, O.V. Stoyanov // International Journal of Adhesion and Adhesives. – 2024. – V. 132. – Article Id. 103692. <https://doi.org/10.1016/j.ijadhadh.2024.103692> (Согласно п.5 Приказа №1586 от 12.12.2016 г. «Об утверждении правил формирования перечня рецензируемых научных изданий...» с поправками согласно Приказу № 99 от 12.03.2018 г.; согласно международной классификации – Q2; согласно рекомендациям ВАК при Минобрнауки России от 21.12.2023 г. №3-пл/1 – K1; уровень в «Белом списке» – 1);

2. **Baldinov, A.A.** Density functional theory substantiation of adhesive interactions between thermoplastics and carbon steel / **A.A. Baldinov**, V.I. Anisimova, I.S. Rodionov, N.V. Ulitin, D.A. Shiyan, I.A. Suvorova, A.O. Sof'in, K.A. Tereshchenko, I.A. Starostina, O.V. Stoyanov // Doklady Physical Chemistry. – 2025. – V. 520. – №2 – P. 52-56. <https://doi.org/10.1134/S0012501625600585> (№76 из Перечня изданий, входящих в международные реферативные базы данных и системы цитирования по состоянию на 31.12.2023 г.; согласно международной классификации – Q4; согласно рекомендациям ВАК при Минобрнауки России от 21.12.2023 г. №3-пл/1 – K2; уровень в «Белом списке» – 4);

3. **Балдинов, А.А.** Влияние гидроксирования поверхности окисленного алюминия на механизм адгезионного взаимодействия с полярным и неполярным полимерами: моделирование методами молекулярной динамики / **А.А. Балдинов**, Н.В. Улитин, В.И. Анисимова, И.С. Родионов, К.А. Терещенко, И.А. Старостина, О.В. Стоянов // Вестник технологического университета. – 2026. – Т. 29, № 2. – С. 42-55. https://doi.org/10.55421/3034-4689_2026_29_2_42 (№826 из Перечня российских

рецензируемых научных журналов, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук по состоянию на 11.02.2026 г.; согласно рекомендациям ВАК при Минобрнауки России от 21.12.2023 г. №3-пл/1 – К2).

На автореферат диссертации поступили отзывы от: доктора химических наук, главного научного сотрудника АО «Центральный Научно-исследовательский институт специального машиностроения» **Далинкевича А.А.**; доктора химических наук, доцента, заведующего лабораторией гетероцепных полимеров ФГБУН Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН **Межуева Я.О.** и доктора химических наук, ведущего научного сотрудника лаборатории стереохимии сорбционных процессов того же Института **Хотиной И.А.**; доктора химических наук, главного научного сотрудника лаборатории математической химии, директора Института нефтехимии и катализа – обособленного структурного подразделения ФГБУН Уфимский федеральный исследовательский центр РАН **Сабирова Д.Ш.**; доктора химических наук, доцента, профессора кафедры физической химии и химической экологии ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий» **Хайруллиной В.Р.**; доктора химических наук, доцента, заведующего кафедрой физической и коллоидной химии ФГБОУ ВО «Ивановский государственный химико-технологический университет» **Шлыкова С.А.**

Все отзывы **положительные**. Имеются вопросы и замечания: 1. Не обоснован выбор степеней полимеризации моделей термопластичных полимеров; 2. При анализе PIEDA (рис.4) не указано, для какого типа связей приведены вклады различных типов взаимодействий в общую энергию адгезионного взаимодействия, что затрудняет интерпретацию (**Далинкевич А.А.**); 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 взаимодействия с полимером (**Межуев Я.О., Хотина И.А.**); 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 (**Сабиров Д.Ш.**); 1. Влияние температуры на адгезионное взаимодействие не обсуждается, все расчеты выполнены при 300 К; 2. Неясно, учитывалось ли взаимодействие ОН-групп между собой на гидроксильной поверхности алюминия (**Хайруллина В.Р.**); 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 гидроксированной поверхности – использовались комбинированные правила Лоренца-Бертло или иные подходы? (Шлыков С.А.).

Выбор официальных оппонентов проводился из числа специалистов, компетентных в вопросах физической химии, моделирования методами квантовой химии и молекулярной динамики; обосновывался их публикационной активностью в этой области и способностью дать профессиональную оценку новизны и научно-практической значимости данного диссертационного исследования.

Ведущая организация (ФИЦ ХФ РАН), в частности, отдел полимеров и композиционных материалов, на заседании которого обсуждался отзыв на диссертацию Балдинова А.А., широко известна своими достижениями в области механики адгезионного взаимодействия в слоистых и волокнистых композитах, в том числе с применением модели контактного слоя для решения задач сингулярности напряжений, исследования масштабных и температурных зависимостей адгезионной прочности соединений «полимер – волокно», влияния электрического поля и многократного отверждения на адгезионные характеристики полимерных матриц, а также синергизма адгезионной прочности в системах «волокно – эпоксиолигоимидное связующее»; разработки методик количественной оценки прочности межфазной границы для волокон с шероховатой поверхностью; исследования физико-механических свойств полимеров и полимерных нанокомпозитов (структура, динамика, деформации, молекулярное моделирование); создания композиционных материалов на основе органических, гибридных и неорганических полимеров, включая функционализированные 2D углеродные наполнители. По этим направлениям сотрудниками указанного подразделения опубликовано большое количество статей в таких журналах, как Materials Physics and Mechanics, Polymer Science, Series D, Chemical Physics of Polymer Materials, Mechanics of Composite Materials, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics, Химическая физика, Пластические массы, Клеи. Герметики. Технологии и др., материалы которых неоднократно докладывались на международных и всероссийских конференциях.

Диссертационный совет 24.2.312.01 отмечает, что наиболее существенные результаты, полученные лично соискателем, и их научная новизна заключаются в следующем:

– с помощью квантово-химических расчетов в рамках теории функционала плотности (DFT) *выявлены* механизмы адгезионного взаимодействия исследуемых полимеров (полиэтилентерефталата, полипропиленкарбоната, полиметилметакрилата, полистирола и полипропилена) с окисленной и гидроксильной поверхностями алюминия;

– на основе расчетов методами DFT энергетических и топологических параметров *установлено*, что наиболее прочное адгезионное взаимодействие в системах «адгезив – атом алюминия» реализуется в случае участия кислородосодержащих адгезивов – полиэтилентерефталата, полипропиленкарбоната и полиметилметакрилата;

– методом PIEDA (Pair Interaction Energy Decomposition Analysis) *получены* количественные оценки вкладов различных типов взаимодействий (электростатических, обменного отталкивания, переноса заряда и дисперсионных) в общую энергию адгезионного взаимодействия в системах «адгезив – окисленная поверхность алюминия» и «адгезив – гидроксильная поверхность алюминия». *Показано*, что рассчитанная сила адгезионного взаимодействия в системах «адгезив – окисленная поверхность алюминия» и «адгезив – гидроксильная поверхность алюминия» коррелирует с экспериментально определенными значениями параметра кислотности;

– с помощью метода молекулярной динамики *установлено*, что прочность взаимодействия адгезивов с окисленной поверхностью алюминия уменьшается в ряду: полиэтилентерефталат > полипропиленкарбонат > полиметилметакрилат > полистирол > полипропилен. Это обусловлено типом и количеством активных центров в них;

– *выявлено*, что гидроксильное покрытие поверхности алюминия приводит к изменению механизма адгезионного взаимодействия в системах «адгезив – гидроксильная поверхность алюминия» (для $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ доминируют электростатические и донорно-акцепторные, а для $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3\text{-OH}$ – дисперсионные) за счет образования более слабых водородных связей, что, в свою очередь, снижает работу адгезии;

– с помощью метода молекулярной динамики *обнаружено*, что прочность адгезионного взаимодействия адгезивов с гидроксильной поверхностью алюминия уменьшается в ряду: полипропиленкарбонат > полиэтилентерефталат > полиметилметакрилат > полипропилен. Это обусловлено наличием гидроксильных групп на поверхности окисленного алюминия. *Отмечено*, что данная тенденция изменения прочности находится в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

– *расширены* представления о механизме адгезионного взаимодействия ряда полимеров (полиэтилентерефталата, полипропиленкарбоната, полиметилметакрилата, полистирола и полипропилена) с окисленной и гидроксильной поверхностями алюминия;

– *выявлено* влияние химического строения полимеров (тип, количество функциональных и характеристических групп) и поверхности субстрата на энергетические характеристики адгезионного взаимодействия, способствующие развитию фундаментальных представлений о его природе;

– *установлены* активные центры адгезивов (полимеров) и типы межмолекулярных взаимодействий между ними и поверхностью алюминия (донорно-акцепторный, электростатический, дисперсионный, посредством водородных связей), позволившие количественно оценить энергетический вклад каждого из них в общую прочность адгезионного взаимодействия.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

– *получены* данные о механизме адгезионного взаимодействия в системах «полимер – атом алюминия», которые могут служить физико-химической основой для проектирования новых композиционных систем полимер-металл и которые могут быть использованы при целенаправленном выборе полимеров в качестве защитных покрытий, клеевых соединений или компонентов многослойных конструкций, применяемых в авиационной, автомобильной и химической промышленности;

– *установлена* взаимосвязь между приведенным параметром кислотности и расчетными силами адгезионного взаимодействия, позволяющая использовать кислотно-основные характеристики для прогнозирования прочности адгезионного взаимодействия в системах полимер-металл и выбирать полимерное связующее в зависимости от состояния поверхности металла;

– *рассчитаны* энергетические характеристики адгезионного взаимодействия, которые могут быть использованы для прогнозирования его прочности в системах полимер-металл с применением методов машинного обучения.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

– применение апробированных методов квантовой химии и молекулярной динамики, которые широко используются при исследовании систем полимер-металл;

– согласованность на качественном уровне результатов моделирования с экспериментальными данными.

Это подтверждает **достоверность** и **обоснованность** полученных результатов и сделанных на их основе выводов.

Личный вклад соискателя состоит в том, что в диссертации представлены результаты теоретического исследования, полученных лично Балдиновым А.А. Соискатель принимал непосредственное участие в сборе и анализе литературных данных, реализации решения задач исследования, анализе результатов, формулировании заключения, написании и подготовке публикаций по результатам работы.

По своему содержанию диссертация Балдинова А.А. соответствует паспорту специальности **1.4.4. Физическая химия** по следующим пунктам:

– в части п.1. Теоретическое определение энергетических и структурно-динамических параметров строения молекул и молекулярных 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 сред и белковом окружении.

Рекомендации по использованию результатов диссертационного исследования.

Материалы диссертации могут быть использованы организациями, занимающиеся экспериментальными и теоретическими исследованиями в области физической химии адгезионных соединений и применения полимерных покрытий как антикоррозионной защиты трубопроводов и технологического оборудования. Среди этих организаций: ФГБУН Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, ФГБУН Институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН, ФГБУН Институт органической химии им. Н.Д. Зелинского РАН, Уфимский институт химии – обособленное структурное подразделение ФГБУН УФИЦ РАН, ФГБУН «ФИЦ «Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН», ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», ПАО «Сибур Холдинг», ПАО «Газпром», ПАО «Татнефть», ПАО «Лукойл» и др.

При защите диссертации не было высказано критических замечаний; соискатель полно ответил на вопросы, задаваемые ему в ходе заседания.

Диссертационным советом 24.2.312.01 сделан вывод, что рассматриваемая диссертация соответствует п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013 г. (в действующей редакции).

На заседании 02.07.2026 г. диссертационный совет 24.2.312.01 принял решение: за выявление с использованием квантово-химических расчетов и методов молекулярной динамики закономерностей адгезионного взаимодействия ряда промышленно значимых термопластичных полимеров, имеющих в своем составе различные функциональные и характеристические группы, с окисленной и гидроксильированной поверхностями алюминия, присудить Балдинову Андрею Андреевичу ученую степень кандидата химических наук по специальности 1.4.4. Физическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет 24.2.312.01 в количестве 19 человек, из них 5 докторов наук по специальности 1.4.4. Физическая химия, участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, проголосовал: за – 19, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель
диссертационного совета

Ученый секретарь
диссертационного совета

А.А. Князев
Е.В. Николаева



А.А. Князев

Е.В. Николаева

02.07.2026 г.