

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы

Гордиевской Юлии Дмитриевны на тему

**«Роль исключённого объёма и гидрофобных взаимодействий в
конформационном поведении ион-содержащих полимеров»,**

представленный на соискание учёной степени

кандидата физико-математических наук

по специальности 02.00.06 - "высокомолекулярные соединения".

Ион-содержащие полимерные системы широко используются в различных отраслях промышленности и играют особую роль в биологических процессах. Однако несмотря на большое число теоретических и экспериментальных работ, посвященных их изучению, остаются неясными существенные детали молекулярных процессов, которые определяют структуру таких систем и их макромoleкулярные свойства. Это связано и с большим разнообразием самих полимеров, и с зависимостью их конформаций от растворителя, состава присутствующих ионов, температуры, ионной силы и других внешних параметров. Существенно, что для таких систем часто отсутствуют хорошо обоснованные теоретические модели, позволяющие объяснить механизмы взаимодействия всех образующих их компонент. В связи с этим работа Ю.Д. Гордиевской, посвященная изучению влияния электростатических и ван-дер-ваальсовых взаимодействий на конформационное поведение полиэлектролитных систем, несомненно является актуальной.

В работе рассматриваются полиэлектролитные микрогели и гидрофобно модифицированные гели в растворах ПАВ, а также конформационные переходы полимерных цепей в малополярных средах. Теоретическое исследование взаимодействия микро- и макрогелей с молекулами поверхностно-активного вещества проводилось в рамках метода самосогласованного поля. Впервые диссертантом были построены теория взаимодействия полиэлектролитного микрогеля с противоположно заряженным ПАВ и теория взаимодействия гидрофобно модифицированного геля с неионогенными молекулами ПАВ, что позволило объяснить и детально описать наблюдаемые коллапс и набухание гелей в широком диапазоне концентрации ПАВ. Представляется важным, что результаты этих исследований имеют не только фундаментальное, но и практическое значение, и могут быть использованы для создания ион-содержащих полимерных материалов с управляемыми свойствами.

Для анализа конформационных переходов в ион-содержащих линейных полимерах диссертант использовал метод молекулярной динамики и крупнозернистые модели полимерных цепей в неявном растворителе. Такой подход позволил впервые провести подробное качественное исследование влияния размера противоионов и состава соли на структуру и подвижность различных по химической структуре полиэлектролитов, а также построить диаграммы состояний полимерной цепи с полярными группами в зависимости от размера полярных групп, жёсткости цепи и величины электростатических взаимодействий.

Особо хочется отметить, что полученные теоретические результаты Ю.Д. Гордиевская стремится в максимальной степени соотнести с экспериментальными данными, что не только обеспечивает достоверность результатов, но и позволяет объяснить ряд наблюдаемых эффектов, в частности, поведение микрогеля в растворе противоположно заряженного ПАВ.

Судя по автореферату, опубликованным статьям и докладам на конференциях, диссертационная работа Ю.Д. Гордиевской соответствует паспорту специальности 02.00.06 – «Высокомолекулярные соединения» (по физико-математическим наукам), а также удовлетворяет критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, и оформлена согласно п. 3.1 этого Положения, а Ю.Д. Гордиевская заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.06 – высокомолекулярные соединения.

Старший научный сотрудник
лаборатории физики и механики полимеров
Федерального исследовательского центра
химической физики им. Н.Н. Семенова
Российской Академии Наук
кандидат физико-математических наук

/Мазо Михаил Абрамович/

27.08.2020г.

Адрес места работы:

119991 Москва, ул. Косыгина 4
ИХФ РАН, тел. 8(495)939 75 15
эл. адрес: mazo@polymer.chph.ras.ru