

Отзыв

доктора химических наук, ведущего научного сотрудника ФНИЦ
"Кристаллография и фотоника" РАН Волкова Владимира Владимировича
на автореферат диссертационной работы Щербины Максима Анатольевича
**«Структура и фазовые превращения низкоразмерных
самоорганизующихся систем различной симметрии»**,
представленной на соискание ученой степени доктора физико-
математических наук по специальности 1.4.7 "Высокомолекулярные
соединения"

Одна из основ теории и практики синтеза полимеров с заданными свойствами состоит в знаниях о молекулярных механизмах взаимодействия фрагментов макромолекул. На этих знаниях основаны предсказания конформации полимерных цепей в процессе самосборки. Разнообразие требований к физико-химическим свойствам полимерных материалов породило огромное количество публикаций на эту тему, как видно из литературного обзора в представленной работе. Тем не менее, постоянно возникают новые вопросы, требующие фундаментальных исследований и представленная работа – яркий пример получения **новых знаний**. В работе рассмотрены детали взаимного влияния и взаимосвязи между формой мезогенной молекулы и характером ее нековалентных взаимодействий с одной стороны, и фазовым поведением системы - с другой. Ответом на эту проблему стало исследование структурных особенностей нескольких типов молекулярных систем и факторов, влияющих на строение полимеров. Установлено влияние на морфологию слабых нековалентных взаимодействий между структурными звеньями полимерного материала. На результат таких взаимодействий оказывают влияние внешние условия, такие как температура, ионная сила раствора, механические и электромагнитные воздействия, что и было изучено. В работе приведены результаты

систематических исследований нескольких классов соединений, образующих жидкокристаллические фазы разного типа. Особенностью исследования стало изучение для каждого класса влияния незначительных вариаций химического строения и размеров мезогенных групп на характер самоорганизации и параметры формирующихся молекулярных структур.

Научная новизна работы состоит в том, что в ней предложена теория кристаллизации высокомолекулярных соединений, обладающая хорошей предсказательностью. Эта теория позволяет как предсказывать форму полимерных монокристаллов, образующихся в тех или иных условиях, так и оценивать скорость вторичного зародышеобразования при кристаллизации и скорости продольного роста граней в различных направлениях. Сформулирован новый взгляд на самосборку и самоорганизацию частично упорядоченных систем различной симметрии. Разработаны новые программные продукты, предназначенные для расчета параметров распределения электронной плотности из картин интенсивности малоуглового рентгеновского рассеяния, а также для определения формы полимерных монокристаллов, ограниченных несимметричными гранями роста. Систематический анализ структурных данных позволил выделить группы новых жидкокристаллических систем с различной степенью порядка, включая термотропные и лиотропные жидкие кристаллы. Автором изучено большое количество нескольких различных классов соединений, способных к образованию жидкокристаллических фаз разного типа, что, в итоге, позволило автору выявить взаимосвязь «структура-свойства» в системах на основе производных 2,3,4-, 3,4,5-три(додецилокси) бензолсульфоновой и галловой кислот, [7]-гетерогелицена, а,а'-диалкилолиготиофенов с различной архитектурой, гемицианиновых красителей и полидиалкоксифосфазенов. Это, наряду с развитой автором теории кристаллизации, определяет научную новизну работы.

В разделе, посвященном экспериментальным методам, автор не только рассматривает методику эксперимента и использованное оборудование, но и подробно описывает теоретические основы методов, что особенно важно для полного понимания представленного текста диссертации и автореферата. Этот раздел обуславливает, помимо предложенной теории кристаллизации, **методическую значимость работы. Практическая значимость и актуальность** исследования определяется перспективностью использования секторообразных соединений в качестве материала ион-селективных мембран с заданной шириной канала, а также высокоэффективных тонкопленочных систем для фотоники и оптоэлектроники. Полученные в работе фазовые диаграммы - зависимости фазового поведения различных классов секторообразных дендронов от температуры и параметров химического строения (длина алифатических частей молекул, величина фокального дендрона, и т.п.) позволят осуществлять тонкую настройку физико-химических параметров тонкопленочных мембран.

Достоверность и обоснованность полученных автором результатов основана на применении взаимодополняющих методов изучения как структуры, так и физико-химических свойств. Данные молекулярного моделирования сопоставлены с рентгеновскими дифракционными данными, включая анализ картин малоуглового рассеяния, в том числе и от тонких пленок. Представлены и обсуждаются результаты, полученные с помощью теплофизических и спектральных методов, оптической интерференционной микроскопии, дифференциальной оптической интенсивности. Полученные данные согласуются с развитой автором теорией кристаллизации высокомолекулярных материалов, изученных в работе, которая имеет хорошую предсказательность.

Результаты работы представлены на международных и российских конференциях. По теме работы автором опубликовано 134 работы, из них 47 статей в изданиях, индексируемых в российских и международных базах данных (РИНЦ, Web of Science, Scopus) и рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Текст автореферата логически последователен, материал изложен достаточно подробно и ясно. Все поставленные во введении задачи исследования раскрыты, описаны пути их решения и обосновываются выводы. **Автореферат полностью отражает содержание текста диссертации.**

Замечаний к тексту автореферата и изложенному в нем материалу нет.

Вывод. Диссертационная работа М. А. Щербины "Структура и фазовые превращения низкоразмерных самоорганизующихся систем различной симметрии" посвящена актуальной теме, имеет фундаментальную научную новизну и высокую практическую значимость, основана на обширном экспериментальном материале и развитой автором теоретической базе.

Диссертационная работа Щербины Максима Анатольевича отвечает всем требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям в соответствии с п. 9-14 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 в редакции Постановления Правительства РФ № 335 от 21.04.2016.

Автор диссертационной работы Щербина Максим Анатольевич заслуживает присуждения искомой ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.4.7. – Высокомолекулярные соединения.

Отзыв составил:

Ведущий научный сотрудник лаборатории
рефлектометрии и малоуглового рассеяния
Института кристаллографии им. А.В.Шубникова
ФНИЦ "Кристаллографии и фотоника" РАН,
доктор химических наук по специальности
01.04.18 "Кристаллография, физика кристаллов"
Волков Владимир Владимирович

" 03 " мая 2022 г.

Федеральное государственное учреждение "Федеральный научно-исследовательский центр "Кристаллография и фотоника" Российской академии наук", Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова, лаборатория рефлектометрии и малоуглового рассеяния.

119333, г. Москва, Ленинский пр-т, д.59.

Тел. +7(499)135-54-50, +7(926)963-38-06

E-mail: vvo@ns.crys.ras.ru, volkicras@mail.ru

Подпись В. В. Волкова заверяю

Ученый секретарь ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

к.ф.-м.н.



/ Дадинова Л. А. /