

## 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 гидроксированной 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](mailto: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](mailto:rector@isuct.ru)

Подпись зав. каф. ФиКХ д.х.н. доц. С.А. Шлыкова удостоверяю.

Проректор ИГХТУ по науке и инновациям

А.А. Гуцин



Вход. № 05 - 9092  
« 25 » 06 2026 г.  
подпись *А.А. Гуцин*