

## ОТЗЫВ

научного руководителя, доктора физ.-мат. наук, профессора РАН С.В. Люлина на выпускную работу бакалавра кафедры молекулярной биофизики и физики полимеров Санкт-Петербургского государственного университета

ДАНИИЛА ИГОРЕВИЧА ДМИТРИЕНКО

«Компьютерное моделирование полиэфиров PLA и PHB»

Выпускная квалификационная работа Д.И. Дмитриенко посвящена теоретическому исследованию полимерных систем на основе перспективных биodeградируемых связующих - полимолочной кислоты (PLA) и полигидроксibuтирата (PHB). Целью работы являлось изучение структурных, динамических и теплофизических свойств смесей на основе PLA и PHB, методами компьютерного моделирования с использованием полноатомных моделей.

В работе перед Д.И. Дмитриенко были поставлены следующие задачи:

- разработка и валидация полноатомных моделей полимерных систем на основе PLA и PHB для проведения компьютерного моделирования;
- изучение структурных, динамических и теплофизических свойств образцов при различных массовых долях компонентов PLA (молекулярная масса 10818 г/моль) и PHB (молекулярная масса 12918 г/моль) в рассматриваемых смесях.

Д.И. Дмитриенко были разработаны модели систем на основе PLA и PHB с различными массовыми долями компонентов и выполнено длительное компьютерное моделирование в течение 5 микросекунд. Показано, что характерный масштаб времен, необходимых для уравнивания рассматриваемых систем при проведении моделирования с использованием полноатомных моделей при температуре 550 К, составляет 2 микросекунды. Согласно полученным результатам, размеры цепей PLA и PHB при смешении не изменяются. Установлено, что использованное для параметризации взаимодействий силовое поле GAFF позволяет довольно хорошо воспроизводить разницу между значениями персистентных длин, параметров растворимости и температур стеклования PLA и PHB. Оценка смешиваемости исследуемых полимеров на основе теории Флори-Хаггинса с использованием данных компьютерного моделирования показала, что между PLA и PHB должна наблюдаться смешиваемость. Проведенный анализ теплофизических и динамических свойств подтвердил данный вывод. Продемонстрировано, что на расстояниях, превышающих 3 нм, цепи PLA и PHB оказываются равномерно перемешанными друг с другом. Обнаружено, что на расстояниях, меньших 3 нм, смешиваемость не наблюдается.

В ходе работы Д.И. Дмитриенко провел детальный анализ литературы по тематике исследования и овладел большим числом современных программных пакетов. Получение результатов потребовало от Д.И. Дмитриенко обработать огромные объёмы данных моделирования. Он зарекомендовал себя как заинтересованный, инициативный и трудолюбивый студент. Полученные результаты были представлены на российских и международных конференциях (первая Всероссийская конференция с элементами научной школы “Компьютерное моделирование гетероциклических полимеров”, 11th International Saint-Petersburg conference of young scientists “Modern problems of polymer science”, International student conference “Science and Progress-2016”). По материалам работы в настоящее время готовится статья.

Выпускная квалификационная работа Д.И. Дмитриенко отвечает всем предъявляемым требованиям и заслуживает самой высокой оценки (отлично), а сам Даниил Игоревич Дмитриенко заслуживает присвоения степени бакалавра по направлению «Физика».

“19” мая 2017 г.

Научный руководитель,  
доктор физико-математических наук,  
профессор РАН,  
директор ИВС РАН

С.В. Люлин

