

ОТЗЫВ

научного руководителя о выпускной квалификационной работе студента 4 курса бакалавриата

Карнауха М.С.

“Молекулярно-термодинамическое моделирование распределения компонентов растворителя между диблоксополимерным агрегатом и объемом раствора”

Способность блоксополимерных агрегатов обратимо солюбилизировать биоконпоненты является основой при разработке целого класса систем контролируемой доставки и высвобождения препаратов. Распределение биоконпонентов между блоксополимерными агрегатами и их окружением исследуется экспериментально и методами компьютерного моделирования в непрерывно возрастающем количестве работ. Однако наметилось некоторое отставание в теоретическом описании систем такого типа в виду сложности их строения: лишь в самое последнее время предприняты отдельные попытки прогнозирования детального распределения добавляемых к раствору биоконпонентов внутри блоксополимерных агрегатов. Поэтому тема выпускной квалификационной работы Карнауха Михаила Сергеевича «Молекулярно-термодинамическое моделирование распределения компонентов растворителя между диблоксополимерным агрегатом и объемом раствора» является весьма актуальной.

В работе рассмотрены неионные диблоксополимерные сферические мицеллы с застеклованными ядрами в многокомпонентном растворителе. Для описания распределения веществ между объемом раствора и набухшей мицеллярной короной среднеполевой вариант теории самосогласованного поля распространен на случай многокомпонентного растворителя. При этом Карнаух М.С. смог провести достаточно сложное теоретическое построение, учитывающее как различие во взаимодействиях компонентов растворителя с полимерными цепями, образующими мицеллярную корону, так и размер присутствующих в растворе агрегатов; научился применять молекулярно-термодинамический подход для моделирования таких систем, самостоятельно вывел теоретические соотношения, описывающие равновесное распределение компонентов внутри мицеллярной короны в контакте с многокомпонентным раствором, построил сложный алгоритм решения интегрального уравнения, разработал программное обеспечение на языке ФОРТРАН, провел систематические расчеты для серий мицеллярных систем, в которых растворитель содержит различные добавки, квалифицированно интерпретировал полученные результаты моделирования, ясно и сжато представил результаты своей работы.

Считаю, что выполненная М.С.Карнаухом выпускная квалификационная работа «Молекулярно-термодинамическое моделирование распределения компонентов растворителя между диблоксополимерным агрегатом и объемом раствора» заслуживает оценки «отлично».

Научный руководитель

A handwritten signature in blue ink, consisting of several loops and a horizontal line, positioned between the text 'Научный руководитель' and the name 'д.х.н., проф. Викторов А.И.'.

д.х.н., проф. Викторов А.И.

29.05.2020