

## **ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ**

**о диссертационной работе Петровского В.С.**

**«Изучение структурирования водных растворов полимеров и синтетических пептидов с ПАВ и гидрофобными мономерами методом атомистического моделирования»,**

**представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.06 - высокомолекулярные соединения**

Петровский В.С. с отличием закончил магистратуру физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова в 2017 году. Осенью этого же года он поступил в аспирантуру физического факультета на кафедру квантовой статистики и теории поля, однако уже в феврале 2018 года перевелся на кафедру физики полимеров и кристаллов и начал работать под моим научным руководством. Имея в своем арсенале опыт молекулярного моделирования полимерных систем в полноатомном масштабе, Петровский В.С. продолжил развивать эту область. В результате интенсивного взаимодействия с коллегами-экспериментаторами Владиславом были получены результаты по компьютерному моделированию, безусловно, имеющие научный, практический интерес и новизну. По этим результатам были написаны 4 статьи, опубликованные затем в высокорейтинговых научных журналах (импакт-фактор каждого журнала выше 14). За время обучения в аспирантуре им были успешно сданы экзамены кандидатского минимума и полностью выполнен учебный план.

Диссертационная работа посвящена вопросам самоорганизации полимерных цепей разного типа, взаимодействующих с низкомолекулярными компонентами, представленными поверхностно-активными веществами и гидрофобными (ароматическими) мономерами. Полученные результаты позволили ответить на ряд вопросов, связанных с фундаментальными свойствами рассматриваемых систем, с одной стороны, а полноатомный масштаб моделирования обеспечил близость полученных результатов к экспериментальным данным, с другой стороны.

Во второй главе диссертации рассматриваются результаты компьютерного моделирования медицинского клея, состоящего из заряженного синтетического пептида и ионных ПАВ. Основным свойством такой системы является высокая адгезия к различному типу поверхностей в водной среде. Показано, что прочность такого комплекса существенно зависит от типа ПАВ, а именно, наличие в структуре ПАВ ароматических групп приводило к значительному упрочнению комплекса пентапептид - ПАВ. Также было получено, что при небольшом стехиометрическом смещении между компонентами системы, происходит увеличение прочности клея. Эти эффекты хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Третья глава диссертации развивает идеи, полученные в предыдущей части и обращается к структуре пептида. Здесь к заряженной цепи был добавлен незаряженный блок, обладающий термочувствительными свойствами. По результатам моделирования был выявлен механизм термочувствительности полученного клея, обусловленный как

коллапсом самого полипептида, так и взаимным притяжением гидрофобных блоков цепи при температуре выше точки НКТР.

Четвертая глава диссертации посвящена исследованию механизма образования асимметричных микрогелей. Был разработан компьютерный эксперимент, в котором было показано, что при отложенном добавлении гидрофобных со-мономеров к растущему гидрофильному микрогелю, со-мономеры образуют капли на полимерной поверхности. Эти капли в свою очередь являлись точками роста асимметричных частей микрогеля. Более того, разная концентрация гидрофобных мономеров приводила к разному качеству смачивания поверхности микрогеля и, соответственно, к различной морфологии синтезируемого микрогеля.

В пятой главе диссертации было проведено исследование свойств гибридной мембраны, сформированной физически сшитыми молекулярными щетками. Такие щетки получались за счет электростатического притяжения заряженных мономеров полиэлектролита и анионных липидов. Далее щетки образовывали везикулы, где центральная часть мембраны везикулы состояла из липидного бислоя, а полиэлектролиты образовывали тонкий слой на поверхностях липидной мембраны. С помощью компьютерного моделирования было показано, что на упорядоченность мембраны влияет исключительно плотность заряда в цепи полиэлектролита, а сами полиэлектролиты имеют стежнеобразную конформацию и образуют слабый жидкокристаллический порядок.

В ходе работы над диссертацией Петровский В.С. приобрел широкий диапазон знаний по физике полимерных систем, овладел новыми методами компьютерного моделирования, проявил себя как самостоятельный исследователь, способный поставить научную задачу и разработать методы ее решения. Отдельно следует отметить высокий уровень адаптации компьютерного эксперимента в работах Петровского В.С. к реальным системам. Петровский В.С. принимает активное участие в работе по грантам РФФИ и РНФ.

Диссертационная работа Петровского В.С. выполнена на высоком научном уровне, удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, и рекомендуется к защите по специальности 02.00.06 - высокомолекулярные соединения.

Научный руководитель, профессор  
кафедры физики полимеров и кристаллов  
Физического факультета МГУ  
имени М.В. Ломоносова,  
доктор физико-математических и  
профессор РАН

И.И. Потемкин  
26.05.2022

Подпись Потемкина И.И. заверяю  
Ученый секретарь Ученого совета  
Физического факультета МГУ  
имени М.В. Ломоносова,  
профессор

В.А. Караваев