

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Акименко Сергея Сергеевича «Моделирование направленных взаимодействий в органических адсорбционных слоях», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия

Актуальность исследований, выполненных в диссертационной работе С.С. Акименко, обусловлена важностью детального понимания движущих сил самоорганизации органических молекул на поверхности твердого тела, так как это является ключом к контролируемому созданию высокоупорядоченных тонких органических пленок. Основное внимание в работе уделяется изучению влияния направленных взаимодействий на поведение адсорбционных монослоев. Для этих целей сформулирована обобщенная решеточная модель адсорбционного монослоя, учитывающая направленный характер межмолекулярных взаимодействий и исследовано несколько ее частных случаев. Полученные результаты качественно согласуются с экспериментальными данными.

Также следует отметить разнообразие применяемых в работе методов, которые позволяют проводить моделирование на различных масштабах. Метод молекулярной динамики и теория функционала плотности применяются для исследования элементов адсорбционной системы на атомарном уровне, а методы Монте-Карло и трансфер-матрицы — для изучения термодинамических особенностей поведения адсорбционного слоя в целом.

В качестве замечания следует указать, что в автореферате не уделяется достаточного внимания вычислительным аспектам работы. Например, неясно какие функционалы использовались в *ab initio* расчетах и почему.

Отмеченный недостаток не снижает общей высокой оценки диссертации, которая обладает несомненной научной новизной. Считаю, что диссертационная работа «Моделирование направленных взаимодействий в органических адсорбционных слоях» соответствует требованиям ВАК предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Акименко Сергей Сергеевич заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата химических наук.

Заведующий кафедрой промышленной химии и химического инжиниринга
Доктор химических наук, профессор



Мурзин Дмитрий Юрьевич
Университет Або Академи,
Турку, Финляндия
Biskopsgatan 8, Turku, 20500, Finland
Тел:+358 2215 4985, dmurzin@abo.fi