

## ОТЗЫВ

научного руководителя о диссертационной работе Мельниковой Софьи Дмитриевны  
**«Компьютерное моделирование многослойных полимерных  
пленок на основе полилактида»**,  
представленной на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук  
по специальности 1.4.7. Высокомолекулярные соединения

Свою работу в Институте высокомолекулярных соединений Российской академии наук Софья Дмитриевна Мельникова начала, обучаясь в магистратуре Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого (СПбПУ). В 2020 году на базе ИВС РАН Софьей Дмитриевной была выполнена магистерская работа. После завершения обучения в СПбПУ С.Д. Мельникова устроилась на работу в ИВС РАН, а в 2021 г. – поступила в очную аспирантуру.

Цель диссертационного исследования, выполненного Софьей Дмитриевной, заключалась в изучении с использованием методов компьютерного моделирования структуры и свойств многослойных полимерных коэкструзионных пленок, а также в установлении основных факторов и механизмов, определяющих совокупность структурных, механических и транспортных свойств таких материалов. Для достижения данной цели в работе были созданы полноатомные модели нескольких типов многослойных пленок на основе полилактида (ПЛА), выполнена разработка методики моделирования этих систем и подробно изучены их свойства. При этом были рассмотрены как монокомпонентные системы ПЛА/ПЛА, так и многокомпонентные ПЛА/поли-3-гидроксибутират (ПГБ), ПЛА/полибутиленсукцинат (ПБС) и ПЛА/полиэтилен (ПЭ), а также проведена вариация толщины отдельных полимерных слоев в изученных материалах. Совокупность исследованных систем позволила установить влияние ряда параметров многослойных полимерных пленок (состава, совместимости полимеров с соседних слоев, толщины слоев) на комплекс их свойств.

В работе было установлено, что даже в случае формирования многослойных пленок с частично совместимыми полимерами в чередующихся слоях, удается достичь метастабильного состояния с сохранением слоистой структуры, оказывающей влияние на свойства материала. При этом в метастабильном состоянии глубина взаимного проникновения цепей полимеров из соседних слоев остается практически постоянной в течении длительного времени. Однако, температура стеклования для таких пленок определяется как промежуточная по отношению к температурам стеклования отдельных компонентов и только для пленок из несовместимых полимеров были обнаружены две температуры стеклования.

При исследовании механических свойств исследуемых пленок при растяжении и сдвига в работе С.Д. Мельниковой показан рост модуля Юнга с уменьшением толщины слоев независимо от совместимости компонентов пленок. Тем не менее, обнаружено, что природа этих изменения различна для пленок из частично совместимых и несовместимых полимеров, хотя и имеет общую природу. Вместе с тем модуль сдвига пленок определяется совместимостью полимеров в слоях и слабо зависит от толщины слоев, что связано со спецификой распространения деформаций в объеме пленок при сдвиговом напряжении.

Примечательный эффект обнаружен при исследовании массопереноса кислорода и углекислого газа между слоями. В том случае, когда полимеры в соседних слоях характеризуются существенной разницей в объеме и скорости релаксации элементов

свободного объема, обнаружено возникновение анизотропии диффузии молекул газов через границу раздела фаз. Этот результат показывает, что транспорт газов через плотные пленки может определяться не только структурными эффектами: наличием кристаллитов и пространственных ограничений для движения молекул газа, но и поверхностями явлениями на границах раздела фаз внутри пленки.

Диссертационная работа, представленная С.Д. Мельниковой является оригинальным исследованием и вносит существенный вклад в развитие представлений о механизмах, отвечающих за формирование комплекса свойств нового типа полимерных материалов – многокомпонентных коэкструзионных полимерных пленок. Полученные результаты имеют ценность с точки зрения фундаментальных основ разработки и прогнозирования свойств новых полимерных материалов.

По материалам диссертации опубликовано 3 статьи в рецензируемых журналах, представлено 7 докладов на всероссийских и международных конференциях.

За время работы над диссертационным исследованием С.Д. Мельникова зарекомендовала себя как самостоятельный грамотный исследователь, способный к постановке научных задач, разработке и реализации методик их решения, анализу и обобщению полученных результатов.

Софья Дмитриевна активно участвовала в выполнении научно-исследовательских работ, выполняемых в рамках тематик НИР филиала НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ - ИВС, а также грантов РНФ и проектов в рамках грантовых программ Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация Софьи Дмитриевны Мельниковой «Компьютерное моделирование многослойных полимерных пленок на основе полилактида» по научной новизне, теоретической и практической значимости полностью соответствует критериям пп. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 № 842 (в действующей редакции), а её автор заслуживает присвоение ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.7. Высокомолекулярные соединения.

Научный руководитель:

исполняющий обязанности директора филиала  
НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ - ИВС,  
заведующий лабораторией

Многомасштабного экспериментального  
исследования и моделирования полимерных  
композитов на основе перспективных  
термопластов для промышленного применения,  
кандидат физико-математических наук

(специальность 02.00.06 – высокомолекулярные соединения)

14.05.2026

Ларин Сергей Владимирович

