

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Мельниковой Софьи Дмитриевны на тему: «Компьютерное моделирование многослойных полимерных пленок на основе полилактида», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.7. Высокомолекулярные соединения

Растущий объем потребления полимерных материалов в настоящее время привел к необходимости создания технологий и материалов, которые бы снижали экологическую нагрузку, связанную с увеличением количества полимерных отходов. В этом направлении наибольший интерес представляет использование материалов, пригодных для многократной переработки или обеспечивающих возможность безопасной утилизации после использования, например, путем компостирования. Полилактид и другие биоразлагаемые полимеры рассматриваются как наиболее перспективные кандидаты для получения материалов с указанными свойствами.

Наряду с этим важную роль играет разработка технологий получения полимерных материалов, позволяющих снижать количество и энергоемкость стадий производства, а также получать материалы без применения дополнительных реагентов (растворителей, адгезивов и т.п.). В области изготовления полимерных пленок и упаковочных материалов в последние годы в качестве такой технологии выступает коэкструзия полимеров, позволяющая в одном технологическом процессе получать пленки из двух и более полимеров. При этом за счет подбора полимеров и варьирования параметров пленки (в первую очередь толщины слоев) можно получать материалы с широким диапазоном эксплуатационных характеристик. Очевидно, что контролируемое изменение свойств таких пленок, а также получение материалов с заранее заданными свойствами, требуют детального понимания того, какие процессы и параметры вносят определяющий вклад в конечные свойства материала.

Таким образом, цель диссертационной работы С.Д. Мельниковой, заключающаяся в исследовании зависимости структуры, механических и транспортных свойств коэкструзионных многослойных пленок на основе полилактида от их состава, толщины слоев и состояния полимеров в слоях, представляется вполне обоснованной, а сама работа – крайне **актуальной**. Полученные в работе результаты, связанные как с определением взаимосвязи структуры и свойств исследуемых материалов, так и с установлением молекулярных механизмов, обуславливающих эту взаимосвязь, имеют несомненную **теоретическую и практическую значимость**.

Диссертационное исследование обладает несомненной **научной новизной**, которая заключается в разработке подхода к изучению свойств многокомпонентных многослойных полимерных пленок методами компьютерного моделирования и в анализе влияния на конечные свойства этих материалов таких факторов, как состав и толщина слоев, совместимость полимеров в слоях и степень их кристалличности. С использованием разработанного подхода показано влияние перечисленных факторов на структурные, теплофизические, механические и газотранспортные свойства пленок.

Диссертационная работа С.Д. Мельниковой изложена на 129 страницах, состоит из введения, обзора литературы, описания используемых моделей и методов моделирования, трех глав, посвященных изложению и анализу результатов исследования, выводов и списка литературы (150 наименований). Диссертация включает 9 таблиц, 27 рисунков и 1 приложение.

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертационного исследования, сформулированы цель и задачи работы, указаны объекты и методы исследования, определены научная новизна и практическая значимость результатов. Приведена структура диссертации, представлены сведения об апробации работы и публикациях по её теме, об основных положениях, выносимых на защиту, и о личном вкладе автора.

В **первой главе** приведён обзор литературных источников по теме исследования. Глубокий анализ современного состояния позволил убедительно обосновать выбор направления научных исследований, а также методов и методик моделирования изучаемых систем.

Вторая глава содержит подробное описание рассмотренных в работе модельных систем – многослойных плёнок на основе полилактида, содержащих различные полимеры (полибутиленсукцинат, поли-3-гидроксibuтират и полиэтилен) в качестве второго компонента. В главе подробно изложена процедура создания модельных систем и описаны детали моделирования; приведены как обоснование используемых параметров моделей и расчётных протоколов, так и оценка адекватности разработанного подхода к изучению рассматриваемых систем.

Третья глава посвящена результатам исследования структуры и теплофизических характеристик модельных пленок. В разделе 3.1 анализируются особенности структуры исследуемых пленок, которая характеризуется распределением плотности в слоях и глубиной межслойной диффузии, при повышенной температуре. Определено влияние совместимости полимеров в слоях на изменение структуры материала в процессе моделирования. В разделе 3.2 рассмотрены динамические характеристики полимерных цепей в многослойных пленках. Анализ диффузии полимерных цепей позволил обнаружить необычный эффект анизотропии подвижности полимеров в пленках на основе несовместимых полимеров. Раздел 3.3 посвящен анализу температур стеклования исследованных полимерных пленок. Показано наличие двух температур стеклования в пленках на основе несовместимых полимеров, тогда как для материалов из совместимых полимеров характерно наличие одной температуры стеклования, что обычно типично для смесей из совместимых полимеров.

В **четвертой главе** содержатся результаты исследования механических свойств многослойных пленок. В начале главы (раздел 4.1) приведена методика оценки механических характеристик рассматриваемых систем для случаев моделирования одноосного растяжения пленок и их сдвиговой деформации. Соответственно, в разделе 4.2 анализируются свойства пленок в случае одноосной деформации материалов в направлении, совпадающем с плоскостью полимерных слоев, а в разделе 4.3 – свойства материалов при сдвиговых деформациях. В главе установлены зависимости механических свойств материалов от толщины полимерных слоев и от совместимости полимеров в чередующихся слоях, определены молекулярные механизмы наблюдаемых изменений, различающиеся в случае несовместимых и частично совместимых полимеров.

В **пятой главе** диссертации рассматриваются транспортные свойства многослойных пленок по отношению к трем газам: кислороду, углекислому газу и водяному пару. Первая часть главы (разделы 5.1 и 5.2) посвящена описанию методики исследования газотранспортных свойств и валидации используемого подхода. В разделе 5.3 содержатся сведения о статистических характеристиках распределения диффундирующих молекул в объеме пленок, показано наличие корреляции между распределением газов в пленках и их растворимостью в отдельных слоях. Анализ динамического поведения молекул газов в

рассмотренных системах (раздел 5.4) позволил установить возникновение необычного эффекта, связанного с анизотропией подвижности молекул кислорода и углекислого газа в пленках ПЛА/ПЭ. Дополнительный анализ структуры и динамического поведения этих пленок (разделы 5.5, 5.6) позволил определить и механизм возникновения этого эффекта.

Считаю, что диссертационная работа **Мельниковой С.Д.** представляет целостное и законченное научное исследование. По результатам диссертации опубликованы 3 статьи в научных рецензируемых журналах, представлено 7 докладов на всероссийских и международных научных конференциях. Автореферат в полной мере отражает содержание диссертационной работы.

Необходимо отметить, что к работе имеется ряд замечаний и комментариев:

1. В подписи к рис. 2.4 следовало указать температуру, при которой были получены приведённые профили плотности. Согласно тексту диссертации, расчёты выполнены при температуре 600 К. Представляется не вполне корректным сравнивать полученные в моделировании значения плотности с экспериментальными данными, соответствующими другим температурным условиям. Для обоснования адекватности модели лучше было либо привести расчёты при температурах, соответствующих экспериментальным данным, либо обсудить температурную зависимость плотности и её влияние на сопоставление с экспериментом.

2. В разделе 4.1 исследуются механические свойства модельных систем пленок при одноосном растяжении и сдвиге. Моделирование процесса деформации выполнено при единственной выбранной скорости деформирования. Поскольку механический отклик полимерных систем существенно зависит от скорости деформирования, выбор конкретного значения требует отдельного обоснования. Представляется целесообразным либо аргументировать выбор принятой скорости деформирования, либо, что было бы предпочтительнее, привести результаты расчетов для ряда скоростей, что позволило бы оценить влияние данного фактора на расчетные прочностные и деформационные характеристики материалов.

3. При описании методики моделирования многослойных полимерных пленок с молекулами кислорода, углекислого газа и воды для исследования процессов массопереноса в главе 5 никак не обоснован выбор концентрации молекул в системе.

4. Следует отметить некоторые неточности в описании работы. В частности, на стр. 37 отмечено: «Затем проводилось ступенчатое снижение температуры до 550 К со скоростью охлаждения 10^9 К/с». Эта фраза содержит логическое противоречие. Ступенчатое охлаждение — это дискретный протокол, «со скоростью...» подразумевает непрерывный и постоянный процесс охлаждения. В описании методов моделирования стоило указать версию программного пакета GROMACS, использованного в расчётах, для обеспечения воспроизводимости результатов.

Приведенные замечания не снижают общей положительной оценки представленной диссертационной работы, не влияют на оценку ее научной новизны, теоретической и практической значимости.

Диссертационная работа Мельниковой С.Д. соответствует паспорту специальности 1.4.7. «Высокомолекулярные соединения по п. 1 «Молекулярная физика полимерных цепей, их конфигурации и конформации, размеры и формы макромолекул, молекулярно-массовое распределение полимеров», п. 6 «Решение теоретических задач, связанных с моделированием молекулярной и надмолекулярной структуры олигомеров, полимеров и сополимеров в растворах, расплавах и полимерных твердых тел в аморфном,

полукристаллическом и кристаллическом состояниях. Разработка модельных представлений о смесях полимеров и полимеров с функциональными ингредиентами и их применение».

В заключение считаю, что диссертация Мельниковой Софьи Дмитриевны «Компьютерное моделирование многослойных полимерных пленок на основе полилактида» удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук и соответствует критериям п.п. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. в действующей редакции, а её автор, Мельникова Софья Дмитриевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 1.4.7. Высокомолекулярные соединения.

Официальный оппонент:

Профессор, Физический факультет,

Отделение физики твердого тела,

Кафедра физики полимеров и кристаллов,

Федеральное государственное бюджетное

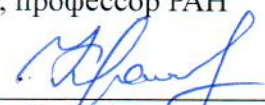
образовательное учреждение высшего образования

«Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова»

доктор физико-математических наук

(02.00.06 – Высокомолекулярные соединения),

доцент, профессор РАН


10.09.2026

Крамаренко Елена Юльевна

119991, Москва, Ленинские Горы 1, строение 2

Федеральное государственное бюджетное

образовательное учреждение высшего образования

«Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова»

Физический факультет, Отделение физики твердого тела,

Кафедра физики полимеров и кристаллов,

Тел.: +7 (495) 939-40-13; e-mail: kram@polly.phys.msu.ru

И.о. декана физического факультета

Московского государственного университета

имени М.В. Ломоносова, профессор



В.В. Белокуров

