

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 75.1.082.01, СОЗДАННОГО НА
БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ
«ПЕТЕРБУРГСКИЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ ИМ. Б.П. КОНСТАНТИНОВА
НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЦЕНТРА «КУРЧАТОВСКИЙ
ИНСТИТУТ», ПОДВЕДОМСТВЕННОГО НАЦИОНАЛЬНОМУ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОМУ ЦЕНТРУ «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ», ПО
ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 01 октября 2026 г. № 16

О присуждении Мельниковой Софье Дмитриевне, гражданке Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Компьютерное моделирование многослойных полимерных пленок на основе полилактида» по специальности 1.4.7. Высокомолекулярные соединения принята к защите 26 июня 2026 г. (протокол заседания № 13) диссертационным советом 75.1.082.01, созданным на базе федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» (188300, Ленинградская обл., г. Гатчина, мкр. Орлова роща, д. 1; приказ о создании диссертационного совета № 899/нк от 25.09.2025 г.).

Соискатель Мельникова Софья Дмитриевна, 03 августа 1996 года рождения.

В 2020 году окончила федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого» с присвоением квалификации «Магистр» по направлению подготовки 03.04.02 «Физика». В октябре 2025 года окончила очную аспирантуру федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» по образовательной программе подготовки научных и научно-педагогических кадров по специальности 1.4.7. Высокомолекулярные соединения; работает в должности младшего научного сотрудника в федеральном государственном бюджетном учреждении «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», подведомственном Национальному исследовательскому центру «Курчатовский институт».

Диссертация выполнена в лаборатории многомасштабного экспериментального исследования и моделирования полимерных композитов на основе перспективных термопластов для промышленного применения филиала федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» -

Институт высокомолекулярных соединений, подведомственного Национальному исследовательскому центру «Курчатовский институт».

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук (специальность 02.00.06 – Высокомолекулярные соединения), Ларин Сергей Владимирович, и.о. директора филиала федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» - Институт высокомолекулярных соединений.

Официальные оппоненты:

1. Василевская Валентина Владимировна, доктор физико-математических наук (02.00.06 – Высокомолекулярные соединения), профессор, заведующая лабораторией компьютерного моделирования макромолекул федерального государственного бюджетного учреждения науки Института элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова Российской академии наук;

2. Крамаренко Елена Юльевна, доктор физико-математических наук (02.00.06 – Высокомолекулярные соединения), доцент, профессор кафедры физики полимеров и кристаллов федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет», г. Тверь,

в своем положительном отзыве, подписанном Сдобняковым Николаем Юрьевичем, доктором физико-математических наук (1.3.8. Физика конденсированного состояния), доцентом, профессором кафедры общей физики,

указала, что «диссертационная работа Мельниковой С.Д. представляет оригинальное целостное и законченное научное исследование, вносящее существенный вклад в развитие методов компьютерного моделирования и физики полимеров в целом. **Достоинством работы** является систематический подход к анализу получаемых на основании компьютерного моделирования результатов. Для обнаруженных особенностей механических и транспортных свойств изученных многослойных пленок проведено исследование возможных молекулярных механизмов, обуславливающих их возникновение, и установлены факторы, определяющие конечные свойства материалов. Работа выполнена на высоком научном уровне с привлечением современных информативных методов исследования и обработки полученных результатов. Результаты работы и разработанные автором диссертации подходы к анализу свойств многослойных коэкструзионных полимерных пленок могут использоваться при разработке новых полимерных материалов с заданными свойствами».

При общей положительной оценке диссертации возникают некоторые вопросы.

1. Можно ли утверждать, что выбранное для моделирования силовое поле единственное и оптимальное? Если нет, то какие физические механизмы могут быть иными при его выборе: число параметров, выбор между парными и многочастичными потенциалами и т.д.?

2. Проверялась ли корректность выбора размеров ячейки моделирования? Не возникало ли при моделировании артефактов периодических граничных условий, например, когда полимерная цепь взаимодействует «сама с собой»?

3. В работе выполнена оценка параметров растворимости рассмотренных полимеров, однако не выполнена оценка поверхностной энергии. Возможно ли это сделать? Существуют ли такие оценки для аналогичных систем на основе экспериментальных данных?

4. Можно ли подтвердить, что разница 100 К между температурами стеклования в эксперименте и моделировании согласуется с логарифмической зависимостью температуры стеклования от скорости охлаждения? Каковы физические причины такой зависимости?

5. Существует ли независимая валидация подхода к определению температур стеклования на основании гиперболической аппроксимации температурных зависимостей плотности?

6. Нужно пояснить почему моделирование механических свойств пленок на растяжение проводилось только в плоскости слоев ХОУ?

7. Необходимо пояснить является ли эффект анизотропии диффузии газов в пленках положительным или отрицательным с точки зрения практического применения материалов? Не может ли этот эффект стимулировать расслоение и в конечном счете разрушение многослойной пленки из-за различия напряжения по различным направлениям?

8. В разделе 5.4 не хватает экспериментальной валидации полученных результатов. Было бы правильно сравнить полученные данные с имеющимися экспериментальными данными.

Соискатель имеет 19 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации – 10, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано – 3 статьи (Computational Materials Science – 1, Journal of Applied Polymer Science – 1, Journal of Polymer Science – 1), входящие в международные реферативные базы данных и системы цитирования Web of Science и Scopus; 7 тезисов докладов на ведущих российских и международных конференциях и симпозиумах. Средний объем статей 12 страниц, средний объем публикаций 4 страницы. Публикации посвящены исследованию методом компьютерного моделирования влияния различных факторов, таких как состав слоев, толщина слоев, совместимость полимеров в слоях и степень кристалличности слоев на структурные, теплофизические и механические свойства многослойных полимерных пленок. В опубликованных работах описана разработка и валидация моделей многослойных пленок, представлены результаты анализа влияния ключевых факторов на структуру, температуру стеклования, а также на такие механические характеристики

как модуль Юнга, модуль сдвига, предел текучести при растяжении и предел текучести при сдвиге. Для многослойных пленок на основе совместимых при выбранных степенях полимеризации полимеров полилактид/поли-3-гидроксibuтират показано наличие одной температуры стеклования при толщине слоев, близкой к радиусу инерции R_g и к $2 \cdot R_g$, тогда как системы с несовместимыми полимерами в слоях полилактид/полиэтилен имели две температуры стеклования. Установлено, что в многослойных пленках на основе аморфных полимеров, независимо от совместимости полимеров в слоях, уменьшение толщины слоев до значений, близких к R_g , приводит к увеличению модуля Юнга. При этом механические характеристики пленок при деформации сдвига мало зависят от толщины слоев и определяются совместимостью полимеров в слоях. Опубликованные результаты могут быть использованы при разработке коэкструзионных многослойных полимерных пленок для прогнозирования их эксплуатационных характеристик. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах. Личный вклад соискателя состоял в анализе литературных данных, проведении компьютерного моделирования, обработке, анализе и интерпретации полученных результатов, а также подготовке публикаций.

Наиболее значительными работами являются:

1. **Melnikova, S.D.** Influence of polymer compatibility and layer thickness on the structural and thermophysical properties of polymer multilayer films / S.D. Melnikova, S.V. Larin // Journal of Polymer Science. – 2023. – V. 61. – № 8. – P. 671 – 684.
2. **Melnikova, S.D.** Mechanical properties of the multilayer polymer films: Molecular dynamics simulations / S.D. Melnikova, S.V. Larin // Computational Materials Science. – 2025. – V. 247. – P. 113545.
3. Kuryndin, I.S. Experimental and Simulation Study of Polylactide/Polyphenylene Oxide Composites: Microstructure, Mechanical and Gas Separation Properties / I.S. Kuryndin, **S.D. Melnikova**, S.V. Larin, A.Y. Pulyalina, A.E. Mukhin, I.I. Faikov, N.N. Saprykina, Z.F. Zoolshoev, G.A. Polotskaya // Journal of Applied Polymer Science. – 2025. – V. 142. – № 30. – P. e57219.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы от:

1. д.ф.-м.н. Аксеновой Елены Валентиновны, профессора кафедры статистической физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет». Отзыв без замечаний.

2. д.ф.-м.н. Патлажана Станислава Абрамовича, ведущего научного сотрудника отдела полимеров и композиционных материалов федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук. В отзыве имеются следующие вопросы:

– Вывод о том, что увеличение модуля Юнга пленок с уменьшением толщины слоев не зависит от совместимости полимеров, сформулирован достаточно широко, тогда как исследование выполнено на ограниченном наборе систем. Поэтому точнее было бы подчеркнуть, что данный вывод установлен для рассмотренных в работе систем (ПЛА/ПБС, ПЛА/ПГБ и ПЛА/ПЭ), а его универсальность требует проверки на других парах полимеров.

– Автор справедливо отмечает, что используемая в моделировании высокая скорость охлаждения приводит к завышению температуры стеклования T_g на 100 К по сравнению с экспериментом. Было бы полезно подробнее обсудить, в какой степени данный фактор может отражаться не только на самой величине T_g , но и на получаемой структуре, степени упорядочения цепей и механических свойствах модельных пленок.

3. д.х.н. Волкова Алексея Владимировича, заведующего лабораторией полимерных мембран федерального государственного бюджетного учреждения науки Ордена Трудового Красного Знамени Института нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук. Отзыв без замечаний.

4. д.х.н., проф. Викторова Алексея Исмаиловича, профессора кафедры физической химии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет». По автореферату имеются следующие вопросы и замечания:

– Несколько неряшливо сформулирована цель работы: вероятно, автор имел в виду не «изучение», а выявление влияния ключевых факторов.

– В последнем абзаце раздела 3.1 обсуждается межфазное, а не поверхностное натяжение.

– При обсуждении рисунка 5, автор утверждает, что для системы ПЛА/ПБС и ПЛА/ПГБ глубина межслойной диффузии достигает приблизительно постоянного значения. Однако на Рис. 5а и 5б четко прослеживается продолжающийся со временем рост.

– Иллюстрация наличия одной и двух температур стеклования, представленная на Рис. 7, неудачна, поскольку различия в кривизнах средней части кривых для разных систем плохо различимы. Не была бы более наглядной иллюстрация данного положения с использованием гиперболической аппроксимации зависимости от плотности?

– Автор отмечает, что физическое состояние полимеров в моделировании при 370 К соответствует их реальному состоянию при комнатной температуре. Не является ли это свидетельством некоторой неадекватности использованного силового поля?

– Сформулированная на качественном уровне вторая часть вывода 5 о том, что области высокой локальной атомной деформации сдвига возникают изначально в аморфной фазе в системах ПЛА/ПЭ, когда ПЭ находится в частично кристаллическом состоянии, представляется тривиальной.

Все отзывы положительные. По мнению лиц, приславших отзывы, автор соответствует ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.7. Высокомолекулярные соединения.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их авторитетом в научном сообществе, как в России, так и за рубежом, а также высокими достижениями в области полимерной науки. Оппоненты имеют многочисленные публикации в области теории и компьютерного моделирования полимерных систем.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработаны модели и методики полноатомного компьютерного моделирования многокомпонентных многослойных полимерных пленок, что позволяет исследовать влияние различных факторов, а именно, толщины слоев, состава слоев, совместимости полимеров в слоях и степени кристалличности полимеров, на структурные, теплофизические, механические и транспортные свойства таких материалов;

предложены подходы к оценке механических свойств многослойных пленок, а также к количественной оценке пластических деформаций на атомном уровне в процессе деформации сдвига и выявлению взаимосвязи полученных результатов с изменением макроскопических характеристик;

доказана перспективность использования современных методов компьютерного моделирования для выявления и анализа факторов, оказывающих значительное влияние на структуру и свойства многослойных полимерных пленок;

введены новые представления о совокупности факторов, оказывающих влияние на теплофизические, механические и транспортные свойства многослойных полимерных пленок, а также о молекулярных механизмах этого влияния.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказано влияние уменьшения толщины слоев в многослойных полимерных пленках до наноразмеров, близких к радиусу инерции полимеров, на модуль Юнга таких материалов в случае аморфных полимеров в слоях, а также возможность возникновения затруднений массопереноса газов через пленку перпендикулярно плоскости слоев в случае чередования слоев полимеров, существенно различающихся размером и скоростью перестройки элементов свободного объема;

применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использован комплексный подход к компьютерному моделированию многослойных полимерных пленок, включающий разработку полноатомных моделей исследуемых систем с использованием результатов квантово-химических расчетов, проведение длительного компьютерного моделирования методом молекулярной динамики, расчет широкого круга физических характеристик

систем и валидацию моделей с помощью сравнения результатов моделирования с имеющимися в литературе экспериментальными данными;

изложены результаты исследования, полученные с помощью компьютерного моделирования структуры и свойств многослойных полимерных пленок на основе полилактида с рядом варьируемых параметров, а именно, с разным составом слоев, толщиной слоев, совместимостью полимеров в слоях и степенью кристалличности полимеров;

раскрыты закономерности влияния толщины слоев, состава слоев, совместимости полимеров в слоях и их степени кристалличности на теплофизические, механические и транспортные свойства многослойных полимерных пленок;

изучены зависимости теплофизических, механических, а также транспортных свойств многослойных полимерных пленок от особенностей состава и строения полимерных слоев, а также от характера взаимодействия полимеров в чередующихся слоях;

проведена модернизация моделей и подходов к компьютерному моделированию многослойных систем с характеристическими размерами нанометрового масштаба, что позволило установить влияние различных факторов, таких как состав слоев, толщина слоев, совместимость полимеров в слоях и степень кристалличности полимеров, на комплекс свойств пленок.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработаны и внедрены (указать степень внедрения) новые подходы к прогнозированию свойств многослойных полимерных пленок с применением компьютерного моделирования, которые могут быть использованы для исследования аналогичных систем, оценки и интерпретации результатов, а также для формирования университетских лекционных курсов с применением информационных технологий;

определены перспективы практического использования компьютерного моделирования как прогностического инструмента для выявления и анализа факторов, влияющих на свойства многослойных полимерных пленок;

созданы новые протоколы моделирования многослойных полимерных систем, подходы к анализу их структуры и свойств, а также получены новые представления о факторах, влияющих на характеристики многослойных пленок;

представлены рекомендации по исследованию влияния различных факторов на теплофизические, механические и транспортные свойства многослойных полимерных пленок с помощью методов компьютерного моделирования.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

для экспериментальных работ и работ по компьютерному моделированию достоверность полученных результатов и сделанных выводов подтверждается их взаимной согласованностью, а также валидацией использованных моделей и методов

моделирования путем сравнения результатов с имеющимися в литературе экспериментальными данными для соответствующих полимеров, из которых состоят системы;

теория и компьютерное моделирование, используемые для анализа и интерпретации полученных результатов, согласуются с имеющимися фундаментальными представлениями, а также экспериментальными и теоретическими работами по теме диссертации;

идея исследования базируется на детальном анализе литературных данных по теме диссертации, свидетельствующем о необходимости выявления и анализа факторов, влияющих на свойства многослойных полимерных пленок, а также установления молекулярных механизмов этого влияния;

использовано сравнение данных, представленных автором, с имеющимися экспериментальными и теоретическими результатами по изучению полимерных систем;

установлено качественное и количественное согласие результатов, полученных автором, с литературными данными по теме диссертации, а также соответствие выводов автора известным фундаментальным принципам;

использованы современные методики сбора и анализа исходной информации, применены современные подходы к компьютерному моделированию полимерных систем, в том числе, современные программные пакеты для моделирования и визуализации данных, а также модели высокого разрешения и расчеты широкого круга физических характеристик для всестороннего изучения исследуемых систем.

Личный вклад соискателя состоит в анализе литературных данных, разработке полноатомных моделей исследуемых систем, проведении компьютерного моделирования методом молекулярной динамики, обработке, анализе и интерпретации полученных результатов, а также подготовке публикаций по теме работы.

В ходе защиты диссертации *критические замечания* высказаны не были.

Соискатель Мельникова Софья Дмитриевна ответила на задаваемые ей в ходе заседания вопросы и привела собственную аргументацию:

- Корректность выбора размеров ячейки моделирования дополнительно проверялась на предварительном этапе исследований. Был рассмотрен случай, когда размеры ячейки моделирования в плоскости xy были меньше, чем выбранные в работе, и близки к радиусу инерции полимеров. Для таких систем наблюдались существенные артефакты моделирования, поэтому они рассмотрены не были. Выбранное силовое поле является оптимальным для исследуемых систем, что подтверждалось валидацией в работе, а также в литературе для рассмотренных полимеров.

- В качестве поверхностных характеристик оценивалось поверхностное натяжение, результаты расчета которого показали хорошее согласие с экспериментальными данными.

- Ввиду того, что скорости охлаждения в моделировании значительно превышают экспериментальные, система не успевает отрелаксировать, в результате чего стеклование в моделировании возникает при более высоких температурах. Подтверждение согласованности различия между температурами стеклования в эксперименте и моделировании с логарифмической зависимостью температуры стеклования от скорости охлаждения для полилактида приводится в литературе.
- Выполненная в моделировании деформация вдоль осей x и y , лежащих в плоскости слоев полимерных пленок, соответствует реальным деформациям, которым может подвергаться многослойная пленка в экспериментальных условиях, в отличие от деформации вдоль оси z , т.е. вдоль нормали к плоскости слоев.
- Валидация определения температур стеклования в моделировании с помощью гиперболической аппроксимации температурных зависимостей плотности выполнялась ранее и известна в литературе.
- С точки зрения возможного улучшения газобарьерных свойств пленок эффект анизотропии диффузии газов является положительным. Предположительно, наблюдаемый эффект не будет способствовать расслоению и разрушению многослойной пленки, однако данный вопрос требует дополнительного дальнейшего анализа.
- Из литературы известно, что на несколько порядков более высокая скорость охлаждения в моделировании по сравнению с экспериментом может влиять также на значения механических характеристик, в частности, на модуль Юнга. Тот факт, что ПЭ в системах в процессе охлаждения не успевает достигнуть высокой степени упорядочения цепей из-за высокой скорости охлаждения в моделировании, позволяет рассмотреть случай аморфного ПЭ в слоях пленки и сравнить его со случаем частично-кристаллического ПЭ. Соответствие физического состояния полимеров в моделировании при 370 К их реальному состоянию при комнатной температуре является следствием разницы температур стеклования в моделировании и в эксперименте вследствие существенных различий в скорости охлаждения, и не связано с некорректным использованием силового поля.

В дискуссии приняли участие: д.ф.-м.н. В.Т. Лебедев; д.ф.-м.н. А.А. Полоцкий; д.ф.-м.н., доц. В.Е. Юдин; д.х.н. А.В. Якиманский – члены диссертационного совета.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертация Мельниковой Софьи Дмитриевны представляет собой завершенное научное исследование в области высокомолекулярных соединений и по актуальности, научной новизне и практической значимости соответствует критериям, установленным пп. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 в действующей редакции.

На заседании 01.10.2026 г. диссертационный совет принял следующее решение: за решение научной задачи, связанной с развитием теоретических представлений о взаимосвязи структуры и свойств многокомпонентных полимерных систем слоистой морфологии и прогнозированием на основании компьютерного моделирования их

свойств, критически важных для использования коэкструзионных полимерных пленок в качестве материалов упаковочного назначения, что определяет практическую значимость работы, присудить Мельниковой С.Д. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 21 человека, входящих в состав совета, проголосовали: за - 15, против - 1, недействительных бюллетеней - нет.

Председатель диссертационного совета
д.х.н.

А.В. Якиманский

Ученый секретарь диссертационного совета
д.х.н.

С.В. Кононова

02.10.2026

