

ОТЗЫВ

об автореферате диссертации Мельниковой Софье 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

Диссертационная работа С.Д. Мельниковой посвящена компьютерному моделированию многослойных полимерных пленок, получаемых коэкструзией, — перспективных упаковочных материалов с заданным комплексом барьерных и механических свойств. В настоящее время фундаментальные вопросы о влиянии толщины слоев, совместимости полимеров и степени кристалличности на структуру и свойства таких пленок изучены еще недостаточно. Этим определяется **актуальность проведенного исследования**, а также его **высокая практическая значимость**: полученные автором данные могут быть использованы при разработке коэкструзионных упаковочных материалов с прогнозируемыми механическими и газобарьерными характеристиками.

Научная новизна работы весьма существенна. Автором впервые разработаны полноатомные модели и выполнено систематическое МД-моделирование многокомпонентных многослойных пленок при варьировании состава, толщины слоев, совместимости полимеров и степени кристалличности. Установлено, что для совместимых полимеров наблюдается одна температура стеклования, промежуточная относительно компонентов, а для несовместимых — две. Показано, что уменьшение толщины слоев до значений порядка R_g приводит к росту модуля Юнга для аморфных полимеров независимо от совместимости, тогда как при частично кристаллическом ПЭ эффект исчезает. Обнаружена и объяснена анизотропия диффузии O_2 и CO_2 в пленках ПЛА/ПЭ, связанная с различием размеров и скорости перестройки элементов свободного объема соседних слоев. **Достоверность полученных результатов и обоснованность выводов работы** сомнений не вызывают.

Автореферат написан ясно, сжато, хорошим языком. Статьи автора опубликованы в высокорейтинговых журналах и достаточно полно отражают содержание автореферата.

По автореферату имеются следующие вопросы и замечания:

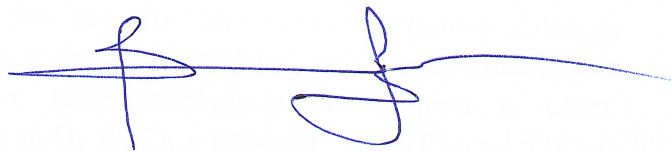
1. Несколько неряшливо сформулирована цель работы: вероятно, автор имел в виду не «изучение», а выявление влияния ключевых факторов.
2. В последнем абзаце раздела 3.1 обсуждается межфазное, а не поверхностное натяжение.
3. При обсуждении рисунка 5, автор утверждает, что для систем ПЛА/ПБС и ПЛА/ПГБ глубина межслойной диффузии достигает приблизительно постоянного значения. Однако на Рис 5а и 5б четко прослеживается продолжающийся со временем рост.
4. 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 гиперполической аппроксимации зависимости от плотности?
5. Автор отмечает, что физическое состояние полимеров в моделировании при 370К соответствует их реальному состоянию при комнатной температуре. Не является ли это свидетельством некоторой неадекватности использованного силового поля?

6. 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.

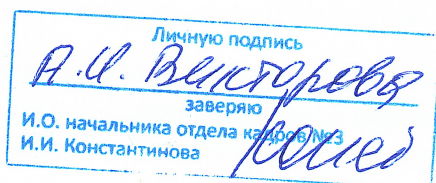
Несмотря на сделанные замечания, считаю, что по актуальности, научной новизне, объему и практической значимости диссертационная работа Мельниковой Софьи Дмитриевны соответствует всем критериям, установленным пп. 9-11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г., № 842 в действующей редакции, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, Мельникова Софья Дмитриевна заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.7. - Высокомолекулярные соединения.

Доктор химических наук по специальности 02.00.04 - физическая химия, профессор, профессор Кафедры физической химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»

Викторов Алексей Исмаилович
е-мейл: a.viktorov@spbu.ru
тел.: +7 921 301 1178



Почтовый адрес: 199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7/9;
тел.: (812) 328-97-01; е-мейл: spbu@spbu.ru.



23 сентября 2026 г