

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы **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.

Работа С.Д. Мельниковой представляет собой обширное исследование влияния различных факторов на структурные, теплофизические, механические и транспортные свойства коэкструзионных многослойных полимерных пленок. Коэкструзионные многослойные пленки являются перспективными упаковочными материалами, поскольку их получение осуществляется посредством непрерывного технологического процесса, позволяющего комбинировать в одном материале слои полимеров, различающиеся по характеристикам, а также варьировать толщину слоев вплоть до нанометровых масштабов, сопоставимых с радиусом инерции полимеров R_g .

В качестве метода исследования в диссертационной работе выбрано компьютерное моделирование методом молекулярной динамики с использованием полноатомных моделей. Данный подход позволил диссертанту провести детальное изучение взаимосвязи между структурой и свойствами многослойных полимерных пленок при варьировании таких ключевых параметров материала, как состав слоев, толщина слоев при размерах близких к радиусу инерции полимеров R_g , совместимость полимеров в слоях и степень кристалличности слоев.

В работе рассмотрены многослойные пленки на основе полилактида (ПЛА) – наиболее перспективного биоразлагаемого полимера. Использование биоразлагаемых полимеров в многослойных полимерных пленках является многообещающим подходом с точки зрения возможности создания экологичных упаковочных изделий с облегченной утилизацией. Другими компонентами систем были биоразлагаемые полимеры полибутиленсукцинат (ПБС) и поли-3-гидроксибутират (ПГБ), а также распространенный полимер упаковочной индустрии полиэтилен (ПЭ). В частности, в работе рассматривалось четыре типа многослойных систем ПЛА/ПБС, ПЛА/ПГБ, ПЛА/ПЭ и ПЛА/ПЛА.

Выполненный анализ теплофизических свойств показал, что в случае совместимых полимеров в слоях многослойных пленок, характеризующихся большим объемом межфазных областей, наблюдается одна температура стеклования для систем, промежуточная по отношению к температурам стеклования компонентов пленки, тогда как системы на основе несовместимых полимеров имеют две температуры стеклования.

Исследование механических характеристик многослойных пленок при деформации продольного растяжения позволило установить, что уменьшение толщины слоев до значений, близких к R_g , приводит к увеличению модуля Юнга, в случае аморфных полимеров в слоях вне зависимости от их совместимости. В работе показано, что модуль сдвига и предел текучести при сдвиге для пленок из несовместимых полимеров близки к значениям для наиболее податливого компонента, тогда как для пленок на основе совместимых полимеров предел текучести при сдвиге близок к значению для наименее податливого компонента. При этом механические характеристики при деформации сдвига определяются совместимостью полимеров и мало зависят от толщины слоев.

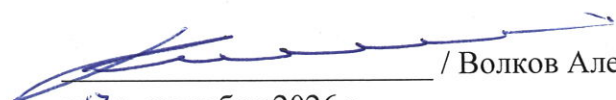
При исследовании процессов массопереноса O_2 , CO_2 и H_2O в многослойных полимерных пленках была выявлена анизотропия диффузии газов O_2 и CO_2 в системах ПЛА/ПЭ. Для того, чтобы ответить на вопрос, с чем связана наблюдаемая анизотропия

диффузии газов, С.Д. Мельникова рассмотрела несколько возможных гипотез. Было установлено, что данный эффект вызван разницей в размерах элементов свободного объема и в скорости их перестройки для полимеров чередующихся слоев пленки, что приводит к затруднению массопереноса через пленку перпендикулярно плоскости слоев.

По результатам работы опубликовано 3 статьи в реферируемых журналах (базы данных Web of Science) и 7 тезисов на всероссийских и международных конференциях. Автореферат оставляет хорошее впечатление о работе, степень обоснованности научных положений и выводов в работе С.Д. Мельниковой не вызывает сомнений.

С учетом изложенного выше, считаю, что диссертационная работа Мельниковой Софьи Дмитриевны «Компьютерное моделирование многослойных полимерных пленок на основе полилактида» полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям согласно критериям, установленным пп. 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 учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.7. Высокомолекулярные соединения.

Доктор химических наук,
профессор РАН,
заведующий лабораторией полимерных мембран
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Ордена Трудового Красного Знамени
Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева
Российской академии наук

 / Волков Алексей Владимирович
«17» сентября 2026 г.

Почтовый адрес: 119991, ГСП-1, г. Москва, Ленинский проспект, д. 29.
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Ордена Трудового Красного Знамени Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук, Лаборатория полимерных мембран (№ 18)

Тел.: +7 (495) 647-59-27, доб.293;

e-mail: avolkov@ips.ac.ru

Специальность, по которой защищена диссертация:

02.00.13 – Нефтехимия; 05.17.18 – Мембраны и мембранная технология

Подпись д.х.н. Алексея Владимировича Волкова заверяю

Ученый секретарь ИНХС РАН, д.х.н. Костина Юлия Вадимовна



