

## 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.

Диссертационная работа С.Д. Мельниковой посвящена исследованию структурных, теплофизических, механических и транспортных свойств многослойных полимерных плёнок в зависимости от состава и толщины слоёв, совместимости полимеров и степени их кристалличности. Установление молекулярных механизмов, определяющих взаимосвязь структуры и свойств таких материалов, необходимо для прогнозирования их эксплуатационных характеристик и разработки многослойных покрытий с заданными физико-механическими и барьерными свойствами. В связи с этим тема данной работы представляется **актуальной** как с научной, так и с практической точки зрения.

Поставленные в диссертации задачи решались методом молекулярно-динамического моделирования многослойных полимерных пленок на основе полилактида (ПЛА). Исследовались следующие сочетания полимеров: ПЛА/ПЛА, полилактид/полибутиленсукцинат (ПЛА/ПБС), полилактид/поли-3-гидроксибутират (ПЛА/ПГБ) и полилактид/полиэтилен (ПЛА/ПЭ). Основное внимание уделялось изучению влияния совместимости полимерных компонентов и толщины отдельных слоёв на структуру и эффективные свойства многослойных плёнок.

Исследование теплофизических характеристик многослойных систем показало, что при толщине слоёв от одного до двух радиусов инерции макромолекул плёнки из совместимых полимеров (ПЛА/ПБС и ПЛА/ПГБ) характеризуются единой температурой стеклования, тогда как в системах из несовместимых полимеров (ПЛА/ПЭ) наблюдаются две температуры стеклования, соответствующие каждому из компонентов.

При продольном растяжении многослойных плёнок из аморфных полимеров установлено, что уменьшение толщины слоёв приводит к увеличению модуля Юнга независимо от совместимости полимеров. В то же время, эффективный модуль сдвига практически не зависел от толщины слоёв. Для плёнок из несовместимых полимеров модуль сдвига и предел текучести при сдвиге близки к значениям наиболее податливого компонента, тогда как для плёнок из совместимых полимеров предел текучести соответствует значению наименее податливого компонента. Анализ пространственного распределения локальной атомной деформации сдвига фон Мизеса выявил различия в механизмах деформирования плёнок из совместимых и несовместимых полимеров, позволив объяснить наблюдаемые различия в их пределах текучести при сдвиге.

В работе установлено, что перенос молекул газов  $O_2$  и  $CO_2$  через многослойную плёнку ПЛА/ПЭ может быть существенно затруднён вследствие анизотропии диффузии. Показано, что данный эффект обусловлен значительными различиями в размерах элементов свободного объёма и скорости их перестройки в соседних полимерных слоях.

После ознакомления с авторефератом возникли следующие вопросы:

1. Вывод о том, что увеличение модуля Юнга пленок с уменьшением толщины слоёв 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 на примере рассмотренных в работе систем

(ПЛА/ПБС, ПЛА/ПГБ и ПЛА/ПЭ), а его универсальность требует проверки для других пар полимеров.

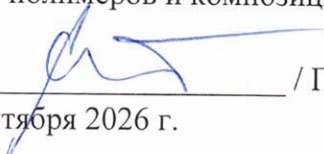
2. Автор справедливо отмечает, что используемая при численном моделировании высокая скорость охлаждения приводит к завышению температуры стеклования  $T_g$  на 100 К по сравнению с экспериментом. Было бы полезно подробнее обсудить, в какой степени данный фактор может отражаться не только на величине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

Приведенные замечания носят дискуссионный характер и не снижают научной значимости и положительной оценки выполненной работы.

Автореферат логично структурирован, материал изложен последовательно, что свидетельствует о глубоком понимании автором исследуемых вопросов. Результаты диссертации опубликованы в рецензируемых научных журналах и прошли апробацию на всероссийских и международных конференциях, что подтверждает их **научную значимость**. На основании автореферата можно заключить, что диссертация С. Д. Мельниковой является завершённым научным исследованием, результаты которого имеют важное **теоретическое и практическое значение**.

Считаю, что диссертационная работа С.Д. Мельниковой «Компьютерное моделирование многослойных полимерных пленок на основе полилактида» полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям согласно критериям, установленным п.п. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утверждённого 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 физико-математических наук (1.4.7. Высокомолекулярные соединения),  
ведущий научный сотрудник ФИЦ ПХФ МХ РАН,  
Отдел полимеров и композиционных материалов,

 / Патлажан Станислав Абрамович  
21 сентября 2026 г.

Адрес: 142432, г. Черноголовка, Московской области, проспект академика Семенова, д.1,  
ФГБУН Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и  
медицинской химии Российской академии наук (ФИЦ ПХФ МХ РАН),  
Отдел полимеров и композиционных материалов.  
Тел.: +7 916 100-62-09; e-mail: sapat@yandex.ru

Подпись ведущего научного сотрудника ФИЦ ПХФ МХ РАН, д.ф.-м.н. Патлажана С.А.  
удостоверяю:

Ученый секретарь ФИЦ ПХФ МХ РАН д.х.н.  
21 сентября 2026 г.

Психа Б.Л.

