

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Комарова Павла Вячеславовича «Многомасштабное моделирование нанодисперсных полимерных систем», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Актуальность темы диссертационной работы П.В. Комарова определяется отсутствием универсальных теоретических подходов для точного описания физико-химических свойств полимерных материалов. В этой связи существует большая потребность в расширении возможностей вычислительных методов способных предсказывать свойства новых полимерных систем исходя из их состава и химического строения.

В диссертационной работе выполнено систематическое исследование широкого спектра нанодисперсных полимерных систем (гидрогель, коллоидная дисперсия из стержнеобразных макромолекул и наночастиц, ионообменные мембраны и нанокompозиты) с использованием методологии многомасштабного моделирования, которая как раз и позволяет изучать практически любые вещества исходя из их химического строения, количественного соотношения компонентов и физических условий. Автор разработал и реализовал различные многомасштабные расчетные схемы, с помощью которых были получены рекомендации по оптимизации свойств изучаемых наноструктурированных материалов. Особенно хочется отметить результаты четвертой главы, где описаны результаты исследований полимерных нанокompозитов на основе полиимидов с помощью упрощенных расчетных схем. Вместе с этим, на мой взгляд, значение весовой доли наполнителя  $w_f \sim 0.2$ , при которой автор наблюдает резкое падение коэффициента теплового расширения полиимида наполненного наночастицами кремния, имеет несколько завышенное значение. Обычно требуется введение меньшей весовой доли наночастиц для изменения теплофизических свойств полимерных матриц. Данный результат требует комментария автора.

В качестве практического применения результатов диссертации можно ожидать, что они могут быть использованы для *целенаправленного поиска полимерных материалов с заданными свойствами*. Все описанные результаты являются новыми, а их общая совокупность, безусловно, может квалифицироваться как *крупное научное достижение в области компьютерного моделирования по предсказанию физико-химических свойств нанодисперсных полимерных систем*.

Автореферат хорошо написан и оформлен. Представленные в нем результаты имеют понятное изложение, выводы обоснованы, а их достоверность подтверждается проведенным сравнением с экспериментальными данными. Основные положения диссертации обсуждались на профильных международных и всероссийских конференциях. Все результаты и выводы диссертационной работы опубликованы в 27 статьях в рецензируемых научных журналах рекомендованных ВАК. Здесь следует отметить, что автор не включил в перечень публикаций ВАК свои работы в журналах «Вестник ТвГУ сер. Химия» и «Конденсированные среды и межфазные границы»,

имеющих в РИНЦ статус ВАКовских изданий. По теме диссертационной работы опубликована глава в коллективной монографии и одна авторская монография, что свидетельствует о высокой научной и педагогической квалификации соискателя.

Считаю, что диссертационная работа П.В. Комарова отвечает всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к докторским диссертациям (пп.9-14 раздела II Положения о присуждении ученых степеней от 24.09.2013), а ее автор, в полной мере, заслуживает присуждения искомой ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.04 – «физическая химия».

Заведующий лабораторией гель-технологии химических волокон отдела растворных и расплавных волокон Открытого акционерного общества «Научно-исследовательский институт синтетического волокна с экспериментальным заводом» (ОАО «ВНИИСВ»), доктор химических наук

В.П. Галицын

«Подпись сотрудника заверяю»  
Ученый секретарь ОАО «ВНИИСВ» к.т.н.



В.И. Исаева

**ОАО «ВНИИСВ»**

Открытое акционерное общество «Научно-исследовательский институт синтетического волокна с экспериментальным заводом»  
Московское шоссе, 157, г. Тверь  
Российская Федерация, 170032, www.vniisv.com