



Федеральное государственное  
бюджетное учреждение науки  
ИНСТИТУТ ТЕХНИЧЕСКОЙ  
ХИМИИ

Уральского отделения  
Российской академии наук  
ул. Академика Королёва, 3,  
Пермь, Россия, 614013  
тел. (342) 237-82-72, факс 237-82-62  
e-mail: info@itch.perm.ru  
http://www.itch.perm.ru

28.04.2014 № 16355/02-223

на № \_\_\_\_\_

Ученому секретарю  
диссертационного совета Д 212.263.02  
к.х.н. доценту Феофановой М.А.

170002, г. Тверь,  
Садовый переулок, 35  
ТВГУ

Направляю Вам отзыв о докторской диссертации Комарова П.В.

Приложение: отзыв о диссертации в 2-х экз. на 1 листе.

Ученый секретарь  
ИТХ УрО РАН, к.т.н.

Чернова Г.В.

**ОТЗЫВ**  
о докторской диссертации Комарова В.П.  
«Многомасштабное моделирование нанодисперсных полимерных систем»  
(по автореферату)

Полимерные композиционные материалы, предназначенные для авиационной и космической техники, должны обладать высокими физико-механическими и термомеханическими характеристиками в широком диапазоне температур. Конечные свойства полимерного материала можно регулировать введением отвердителя, наполнителя и различных модифицирующих нанодобавок. Как правило, подбор новых компонентов проводится чисто эмпирически, а его свойства определяются экспериментально. При этом затрачиваются большие средства, а сделанный выбор часто бывает не оптимальным. Обсуждаемая тема докторской диссертации является актуальной поскольку касается предсказания свойств разрабатываемых материалов.

Следует отметить, что предсказание свойств сетчатых полимеров представляет достаточно сложную задачу. Несмотря на это, автору удалось разработать универсальный алгоритм для моделирования полимерных сеток, полученных например, отверждением циклоалифатической эпоксидной смолы 3,4-эпоксициклогексилметил-3,4-эпоксициклогексанкарбоксилата 4-ангидридом метилгексагидрофталевой кислоты. Рассчитанные физические характеристики полимеров – плотность и температура стеклования хорошо согласуются с экспериментальными данными.

Разработанный алгоритм был реализован по схеме сопряжения: кванто-механический → мезоскопический → атомистический уровень моделирования и адаптирован для генерирования полиимидных полимерных матриц, содержащих оксид кремния в форме β-кристаллита и алкилсиланил.

Полученные результаты вносят важный вклад в развитие нового научного направления в компьютерной химии – целенаправленного дизайна функциональных полимерных материалов. Предлагаю автору в дальнейшей работе расширить круг полимерных систем нового поколения.

Представленная докторская диссертация выполнена на высоком научном уровне, обладает научной новизной, практической полезностью. Автор заслуживает присвоения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 02.00.04. – физическая химия.

Ведущий научный сотрудник  
ИТХ УрО РАН, д.т.н.

Федосеев М.С.

Подпись д.т.н. Федосеева М.С. удостоверяю

Ученый секретарь  
ИТХ УрО РАН, к.т.н.



Чернова Г.В.