

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы **Мифтахова Эльдара Наилевича** на тему «**Исследование физико-химических закономерностей процессов синтеза полимеров методами компьютерного и имитационного моделирования**», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по научной специальности 1.4.4 Физическая химия

Исследование, проведенное в рамках данной диссертации, находит свою **актуальность** в современном мире, где полимеры становятся неотъемлемой частью повседневной жизни и приобретают беспрецедентное значение в различных отраслях, включая медицинский и военно-промышленный сектор. Физико-химические особенности протекания таких процессов определяют их как сложные и многокомпонентные системы, требующие глубокого исследования и учета всех значимых факторов производства. Задачу исследования подобных систем ставит соискатель в данной диссертационной работе, результатом которой является формирование нового системного и методологического подхода, включая возможные физические и химические аспекты, усложняющие процесс модельного описания системы.

Объект исследования представляет собой цепные параллельно-последовательные реакции с участием активных частиц, что составляет суть процессов синтеза полимеров.

Несмотря на то, что в современной науке уже достаточно много работ, которые в той или иной степени определяют методологические аспекты моделирования, соискателю удалось подойти к данному вопросу исходя из позиций унифицированности как химического описания, так и технологических аспектов ведения процесса. В результате получен достаточно мощный инструмент для проведения комплексного исследования с учетом переменных, влияющих на ход реакции.

Теоретическая значимость созданных подходов и методов комплексного моделирования заключается в их способности расширить фундаментальное понимание химических и физических принципов, лежащих в основе образования полимерных материалов. Эти методы помогают исследовать химизм синтеза, что дает возможность разрабатывать новые теоретические модели и концепции в области физической химии.

Практическая значимость определяется возможностями созданных в работе вычислительных инструментов, ориентированных на проведение

комплексного исследования, а также методов и алгоритмов, позволяющих детально описывать сложные межмолекулярные взаимодействия и учитывать все внешние факторы их протекания.

Отрадно видеть, что проводимые исследования не являются чисто теоретическими, а связаны с процессами промышленного производства. На каждом из этапов решения задач соискатель проводит сравнительный анализ с результатами лабораторных/производственных экспериментов, поэтому достоверность полученных результатов и выводов не вызывает сомнений.

К основным результатам, определяющим научную новизну работы, можно отнести

- новый имитационный подход к решению обратных задач, позволяющий на основании первичной физико-химической информации в виде данных по молекулярно-массовому распределению получаемого продукта проводить исследование кинетической неоднородности путем организации серии статистических испытаний;

- разработанный комплексный подход к исследованию механизмов сложных процессов, объединяющий инновационные технологии компьютерного и имитационного моделирования для решения прямых и обратных задач химической кинетики;

- методы числовой оценки молекулярно-массового распределения, размер-состава и композиционного состава образующихся макромолекул для процессов гомо- сополимеризации, включая адаптацию до масштабов непрерывного производства;

- разработанная вычислительная система, предназначенная для комплексного изучения процессов синтеза полимеров с использованием авторских методов и алгоритмов.

Содержание диссертационного исследования соответствуют пунктам паспорта специальности 1.4.4. Физическая химия, а основные научные результаты представлены в рецензируемых научных изданиях из перечня Web of Science, ВАК и Scopus. У соискателя имеется 9 свидетельств о государственной регистрации программ для ЭВМ.

В качестве вопросов и замечаний можно отметить:


1. В автореферате соискатель достаточно избирательно подошел к вопросу описания исходных условий при описании вычислительных экспериментов - не везде приведены молярные концентрации.

2. Из кинетической схемы, которая представлена на с.19 не совсем ясно, чем руководствовался соискатель при игнорировании кинетических закономерностей реакции инициирования.

Но сделанные замечания не сказываются на общей положительной оценке от проделанной работы, научная и практическая значимость которой очевидны.

Считаю, что диссертационная работа «Исследование физико-химических закономерностей процессов синтеза полимеров методами компьютерного и имитационного моделирования» по новизне, научной и практической значимости, достоверности полученных результатов является научно-квалификационным исследованием, совокупность результатов которого можно квалифицировать как научное достижение в области изучения сложных физико-химических процессов. Представленная работа отвечает требованиям пункта 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением №842 Правительства РФ от 24.09.2013 г., а ее автор Мифтахов Эльдар Наилевич, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по научной специальности 1.4.4 Физическая химия.

Доктор технических наук, профессор, директор Казанского научно-исследовательского института полимеров и спецкаучуков, заведующая кафедрой «Технология синтетического каучука» ФГБОУ ВО «Казанский национальный исследовательский технологический университет»

 / Зенитова Любовь Андреевна

Докторская диссертация защищена по специальности 02.00.06
Высокомолекулярные соединения.

Даю согласие на обработку персональных данных

Почтовый адрес: 420015, г. Казань, ул. К.Маркса, 68;
телефон: +7(843)231-42-59; e-mail: liubov_zenitova@mail.ru

Подпись Зенитовой Л.А.

удостоверяю.
Начальник отдела по работе с
сотрудниками ФГБОУ ВО «КНИТУ»
А.Р. Урешишев
06.10 2013 г.

