

ОТЗЫВ

На автореферат диссертации Зайцевой Елены Сергеевны «Применение модели решеточного газа к изучению термодинамики капель в объеме, на поверхностях и в изолированных порах», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

Основная задача диссертационной работы Е.С. Зайцевой состояла в разработке подходов к молекулярному моделированию распределения молекул в неоднородных малых системах для одно- и двухкомпонентных расслаивающихся фаз пар – жидкость и пар – твердое тело (трехмерных капель в объемной фазе и двухмерных капель на поверхностях, в связанных и изолированных порах), когда определяющий вклад в расчетные термодинамические характеристики вносят границы раздела между фазами и поверхностный потенциал стенок пор. Актуальность такого исследования очевидна, поскольку функциональные характеристики разнообразных дисперсных и пористых наноматериалов, элементы структуры которых имеют характерные размеры от нескольких нанометров до сотен нанометров, определяются именно особенностями молекулярной организации таких систем на указанных наномасштабах.

В основе используемого теоретического аппарата – модель решеточного газа, в рамках которой вводятся функции распределения частиц и рассчитываются термодинамические функции решеточной системы в квазихимическом приближении учета межмолекулярных взаимодействий. Для этого Е.С. Зайцевой были разработаны подходы для моделирования неоднородных решеточных систем, выведена система соответствующих уравнений, позволяющих рассчитать плотности объемных фаз и концентрационный профиль неоднородных областей между ними.

Были разработаны алгоритмы на базе кластерного подхода для расчета физико-химических характеристик, в том числе поверхностного/линейного натяжения границы раздела фаз, малых бинарных систем пар – жидкость и пар – твердое тело, с учетом вклада в термодинамические свойства системы областей с неоднородными молекулярными распределениями, соизмеримых по размерам с малыми сосуществующими фазами.

Выполнен большой объем численных расчетов. Рассчитаны температурные зависимости поверхностного натяжения $\sigma(T)$ 19 низкомолекулярных веществ различной природы (инертные газы, двухатомные газы, оксиды неметаллов, углеводороды и галогены) и их смесей и 19 металлов и их сплавов в объемной фазе. Для всех рассмотренных веществ и смесей получены оценки минимального размера R_0 малых капель, обладающих внутри себя свойствами однородной фазы и соответствующие ее термодинамической устойчивости. В широком диапазоне температур для разных по природе капель было получено практически универсальное поведение зависимости R_0 от температуры, нормированной на критическую температуру.

Разработана «координационно-сферная» модель переходной области границы расслаивающейся жидкости с собственным паром для уточнения минимального размера R_0 капель малого радиуса. Данная модель структуры капли позволяет исключить структурный параметр слоевой модели.

Изучено влияние ограниченности размеров системы (объема полостей и площади граней) на состояние сосуществующих фаз (трехмерных и двухмерных капель с собственным паром) и на молекулярные распределения в переходной области между фазами. Впервые прямым молекулярным расчетом для трехмерных и двухмерных капель показано, что при уменьшении объема полостей и площади граней, соответственно, происходит понижение критических параметров расслаивания фаз, ширина неоднородной области между фазами сужается, и убывает поверхностное/линейное натяжение капель.

Я очень высоко оцениваю исследование Е.С. Зайцевой, выполненное на высоком профессиональном уровне. Работы Е.С. Зайцевой опубликованы в рецензируемых

журналах, рекомендованных ВАК, результаты работы многократно докладывались на Всероссийских конференциях и симпозиумах.

Диссертационная работа Е.С. Зайцевой является научно-квалификационной работой, в которой на основе проведенных ее автором исследований продемонстрирована универсальность теоретического подхода молекулярного моделирования на базе модели решеточного газа для описания многофазных систем, включающих конденсированные фазы в термодинамическом равновесии с собственным паром и локально неоднородные области различной природы (переходные области границы раздела фаз, неоднородные поверхности адсорбента, область полислойной адсорбции на адсорбентах), с целью получения данных о физико-химических характеристиках неоднородных систем пар – жидкость и пар – твердое тело. Работа Е.С. Зайцевой удовлетворяет всем критериям п.п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям. У меня нет сомнений, что Е.С. Зайцева заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – Физическая химия.

И.о. проректора НИЯУ МИФИ,
доктор технических наук,
профессор

Каргин Николай Иванович

115409, г. Москва, Каширское ш., 31.
НИЯУ МИФИ
Тел. +7 (495) 788 56 99 доб. 8146
E-mail: NIKargin@mephi.ru



Ирина Валентиновна Ташкина Сергиева