

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Зайцевой Елены Сергеевны «Применение модели решеточного газа к изучению термодинамики капель в объеме, на поверхностях и в изолированных порах», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

В настоящее время значительный интерес представляют моделирование молекулярных распределений в малых системах и телах и расчет их термодинамических свойств, в частности поверхностного натяжения. Поверхностное натяжение представляет собой основную физико-химическую характеристику поверхностного слоя конденсированных фаз на границе с сосуществующими фазами. Проведение эксперимента для исследования свойств поверхности конденсированных фаз многокомпонентных систем зачастую затруднено. В виду несовершенства используемых в практике методик и невозможности обеспечения отсутствия примесей в растворах, имеющиеся экспериментальные данные по поверхностному натяжению сильно расходятся друг от друга. Поэтому огромное значение имеет теоретическое описание физической сущности феномена поверхностного натяжения, и проблема расчета равновесия неоднородных систем, особенно при малом их размере, когда появляется размерный эффект, продолжает оставаться актуальной и в настоящее время.

В диссертации Зайцевой Е.С. проводится молекулярное моделирование распределения молекул в неоднородных малых системах на примере капель для одно- и двухкомпонентных расслаивающихся фаз пар – жидкость (трехмерных капель в объемной фазе и двухмерных монослойных капель на поверхностях, а также в изолированных порах) в рамках модели решеточного газа, которая является традиционным методом фазовых превращений, удобным для анализа концентрационных свойств

границ раздела фаз, и отличается быстротой компьютерных расчетов по сравнению со стохастическими подходами.

Основные результаты работы Зайцевой Е.С. заключаются в следующем:

1. Получены в широком интервале температурные, концентрационные и размерные зависимости поверхностного натяжения низкомолекулярных веществ различной природы и их смесей и металлов и их сплавов. Предложены новые нормированные координаты графиков температурной зависимости поверхностного натяжения, обеспечивающие унифицированное описание веществ различной природы и дополняющие оценки физико-химических характеристик низкомолекулярных веществ из закона соответственных состояний.

2. Разработана методика анализа и рассчитаны физико-химические характеристики, главным образом, линейное натяжение, двухмерных монослойных капель адсорбата на различных гладких гранях монокристаллов. Исследованы особенности влияния перехода от трехмерной к двухмерной системе на размерные эффекты термодинамических свойств капель, связанные с дискретной природой вещества.

3. Изучено паро-жидкостное фазовое расслоение в малых системах: трехмерные капли в малых полостях и двухмерные капли на гранях конечного размера. Проведен анализ влияния ограничения размера системы на состояние сосуществующих фаз и на переходную область раздела фаз.

4. Разработана модель структуры шероховатой поверхности аэрозоля сферической формы малого размера, представленного его переходной областью, позволяющей самосогласованным образом найти все адсорбционные центры поверхности.

При чтении работы у меня возник следующий ряд вопросов и замечаний:

1. Без сомнения, модель решеточного газа (МРГ) очень хорошо зарекомендовала себя при описании макроскопических объектов. Но диссертация посвящена попыткам применить эту модель для описания малых объектов, в которых роль поверхности оказывается определяющей. В диссертации (и автореферате) этому обстоятельству уделено мало место. Между тем, этот момент исключительно важный.

2. Конечно, поверхностное натяжение – исключительно важная характеристика объектов малого размера. Она вводится по-разному разными авторами. Очень часто это коэффициент при квадратичном по размеру члене разложения термодинамических потенциалов. Не исключено, что он может оказаться и отрицательным, что не означает неустойчивость объекта, т.к. он удерживается за счет вклада объемных слагаемых. Мне кажется, что в диссертации стоило бы уделить больше внимания сравнению результатов различных подходов.

3. У меня есть претензии к рисункам. Подрисуночные подписи должны давать полное представление о том, что изображено на рисунке, так, чтобы все было понятно без обращения к основному тексту.

4. Несколько необычно выглядит автореферат. В нем нет формул, хотя диссертация представляется на соискание ученой степени по физико-математическим наукам. Стоило бы часть пояснений вести с помощью формул.

Тем не менее, рецензируемую работу я оцениваю очень высоко. Зайцевой Е.С. проделана очень большая и продуктивная работа по описанию физико-химических характеристик малых систем с различным характером неоднородных областей, вносящих существенный вклад в свойства систем. Выделены новые общие для веществ различной природы температурные и размерные зависимости поверхностного натяжения равновесных капель в нормированных единицах. Представлены результаты исследования нового объекта, равновесной двухмерной капли, сконденсированной в монослое на поверхности монокристалла,

сосуществующей с двухмерным паром в том же монослое. Впервые разработана модель, позволяющая получить структурно-неоднородные молекулярные распределения шероховатой поверхности аэрозоля, отражающие реальную дефектную структуру. Представленные в диссертации исследования убеждают в оригинальности постановки задачи и полученных результатов.

Результаты диссертационной работы могут быть использованы в научно-исследовательской практике в таких научных центрах, как химический и физический факультеты Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова и Санкт-Петербургского государственного университета, Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л.Я. Карпова, институт физической химии и электрохимии им. А.Н. Фрумкина РАН и др.

Поэтому диссертация Зайцевой Е.С. может рассматриваться как законченная научно-квалификационная работа, в которой содержится решение задач по молекулярному моделированию малых систем с неоднородными молекулярными распределения различного характера и расчету их термодинамических свойств с учетом размерного эффекта.

По новизне и практической значимости диссертационная работа Зайцевой Е.С. соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (в редакции постановления Правительства Российской Федерации от 24.09.13 №842), предъявляемым к кандидатским диссертациям, поскольку в ней предложено решение задач, имеющих существенное значение для исследований в области физической химии, и соответствует пп. 3, 4, 5 и 6 паспорта специальности 02.00.04 – «Физическая химия» в соответствии с Номенклатурой специальностей научных работников, а ее автор, Зайцева Е.С., заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук. Опубликованные Зайцевой Е.С. работы (12 статей в изданиях, входящих в международные реферативные базы данных и

систем цитирования (Scopus, Web of Science)) полностью отражают содержание диссертации.

Главный научный сотрудник  
Федерального государственного  
бюджетного учреждения науки  
Геофизический центр  
Российской академии наук (ГЦ  
РАН), доктор физико-  
математических наук по  
специальности 02.00.04 –  
«Физическая химия»

Лушников Алексей Алексеевич  
119296, г. Москва,  
ул. Молодежная, д.3  
Тел. +7 (499) 242-17-12  
alex.lushnikov@mail.ru

Собственноручную подпись А.А. Лушникова  
заверяю

 - В.И. Засета  
Глав. спец. по кадрам

