

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.259.02 на базе
Института физической химии и электрохимии им. А.Н.Фрумкина РАН по
диссертации на соискание ученой степени КАНДИДАТА наук

Аттестационное дело №

решение совета от 5 апреля 2018 г, протокол № 6

О присуждении **Зайцевой Елене Сергеевне**, гр. РФ, ученой степени
кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Применение модели решеточного газа к изучению
термодинамики капель в объеме, на поверхностях и в изолированных порах»
по специальности 02.00.04-физическая химия принята к защите 2 февраля
2018 г., протокол № 2 диссертационным советом Д 002.259.02 на базе
Института физической химии и электрохимии им. А.Н.Фрумкина РАН,
119071 Москва, Ленинский проспект, д.31, корп.4, приказ № 2249-1588 от
09.11.2007.

Соискатель Зайцева Елена Сергеевна , 1992 г. рождения, гражданка России,
окончила в 2014 г. Национальный исследовательский технологический
университет МИСиС. С 2014 по настоящее время обучается в аспирантуре
филиала АО Научно-исследовательского физико-химического института им.
Л.Я.Карпова.

Диссертация выполнена в лаборатории теории физико-химических процессов
НИФХИ им. Л.Я.Карпова.

Научный руководитель–доктор физико-математических наук Юрий
Константинович Товбин, заведующий этой лабораторией.

Официальные оппоненты

Лушников Алексей Алексеевич, доктор физико-математических наук,
главный научный сотрудник Геофизического центра РАН ,

Тытик Дмитрий Леонидович, доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник лаборатории физикохимии коллоидных систем
Института физической химии и электрохимии им. А.Н.Фрумкина РАН

дали положительные отзывы.

Ведущая организация – Санкт-Петербургский государственный университет в своем положительном заключении, составленном доктором химических наук А.И.Викторовым, зав. кафедрой физической химии и доктором физико-математических наук Е.Н.Бродской, ведущим научным сотрудником этой кафедры, и утвержденном С.В.Микушевым, и.о.проректора по научной работе, отмечает, что Зайцевой предложены новые температурные координаты для поверхностного натяжения, позволяющие аппроксимировать одной кривой зависимость поверхностного натяжения низкомолекулярных веществ от температуры в интервале от температуры плавления до критической.

Соискатель имеет по теме диссертации 26 научных работ, общим объемом 123 страниц, в том числе 11 статей в журналах, рекомендованных ВАК. Наиболее значительные работы:

1. Товбин Ю.К., Зайцева Е.С., Рабинович А.Б. Влияние внутренних движений адсорбата на характеристики адсорбции в случае структурно-неоднородных поверхностей щелевидных пор. // Журнал физической химии. – 2016. - Т.90, № 1. –С.138-146.
2. Товбин Ю.К., Зайцева Е.С. Расчет поверхностного натяжения бинарных растворов простых флюидов соизмеримых размеров. // Журнал физической химии.-2017.-Т.91,№11.-С.1906-1916
3. Товбин Ю.К., Зайцева Е.С., Рабинович А.Б. Моделирование рельефа поверхности наноаэрозолей, получаемых быстрым охлаждением капель. // Журнал физической химии. – 2018. –Т.92,№3. С.473-482

На диссертацию и автореферат поступило 7 положительных отзывов: ИФХЭ РАН, где работа проходила предварительную экспертизу; Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова (д.х.н. М.Я.Мельников); Институт математических проблем биологии РАН (к.ф.-м.н. Н.К.Балабаев); Институт катализа им. Г.К.Борескова СО РАН (д.х.н. В.Ю.Гаврилов); Институт химической физики им. Н.Н.Семенова РАН (д.ф.-м.н. М.Г.Голубков); Научно-исследовательский ядерный университет МИФИ (д.ф.-м.н. В.А.Загайнов, д.т.н. Н.И.Каргин).

В них содержатся следующие замечания, которые не снижают общую положительную оценку работы: желательно было бы подробнее рассмотреть изменение критических параметров (температуры и давления) системы с изменением размера системы и отдельных фаз; чем обусловлены отличия в температурных зависимостях минимального радиуса капли для чистых веществ и их смесей; какова природа скачка в размерных зависимостях поверхностного/линейного натяжения двумерных/трехмерных капель; мало количество режимов, в которых рассматривалось влияние изменения размера системы на термодинамические свойства существующей в ней капли; было бы полезно обсудить возможности получения в рамках разработанного подхода данные по поверхностному натяжению в различных средах; в автореферату отсутствует обсуждение отмечаемого в литературе экспериментального факта образования твердой фазы Ag при температуре жидкого азота на непористых (макропористых) образцах в области полислоистой сорбции.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработаны алгоритмы на основе молекулярной теории для расчета термодинамических свойств объемных фаз и неоднородных областей между ними в рамках единого подхода в малых системах;

предложены методика анализа физико-химических характеристик двумерных монослойных капель адсорбата на различных гладких гранях монокристаллов, представляющих начальный этап гетерогенного фазообразования и новая «координационно-сферная» модель переходной области границы расслаивающейся жидкости с собственным паром для уточнения минимального размера R_0 капель малого радиуса;

установлен универсальный характер зависимости поверхностного натяжения капель чистых веществ различной природы от их радиуса в нормированных координатах при фиксированной приведенной температуре.

Теоретическая значимость исследований обусловлена тем, что:

доказана перспективность применения модели решеточного газа (МРГ) для исследования фазовых расслоений в малых системах;

применительно к проблеме установления минимального размера фазы (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) **использована** новая разработанная «координационно-сферная» модель переходной области границы расслаивающейся жидкости с собственным паром, в том числе позволяющая рассчитывать физико-химические характеристики малых тел без привлечения дополнительных решеточных параметров, подобно традиционной слоевой модели МРГ;

изучены молекулярные распределения на шероховатой поверхности аэрозоля малого размера сферической формы, полученного при быстром охлаждении капель, для быстрой оценки его емкости монослоя и удельной поверхности;

предложены новые координаты, обобщающие температурные зависимости нормированного поверхностного натяжения различных веществ и их бинарных смесей что позволило распространить закон соответствующих состояний на поверхностное натяжение;

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что

разработаны алгоритмы на базе уравнений на молекулярные распределения для расчета физико-химических характеристик в рамках модели решеточного газа, и в первую очередь, поверхностного/линейного натяжения границы раздела фаз, исследуемых малых неоднородных систем, включающих как сосуществующие объемные фазы (пар, жидкость, твердое тело), так и локально неоднородные области различной природы (переходные области границы раздела фаз, неоднородные поверхности адсорбента, область полислоистой адсорбции на адсорбентах);

определены температурные, концентрационные и размерные зависимости поверхностного натяжения капель веществ различной природы в широком интервале значений;

создан комплексный подход для расчета термодинамических функций малых систем с неоднородными областями различного характера.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что

для теоретических расчетов результаты получены при использовании современных методов моделирования фазовых расслоений в малых неоднородных системах, где вклад поверхности в термодинамические функции соразмерен с объемным;

идеи базируются на анализе накопленного опыта теоретического описания равновесных многофазных систем, исходя из молекулярных распределений между фазами;

использовано сопоставление полученных теоретических данных с известными литературными данными;

установлено качественное и количественное совпадение полученных теоретических результатов с результатами, представленными в независимых источниках.

Личный вклад соискателя состоит в:

Непосредственном участии в построении математической молекулярной модели на базе кластерного подхода для описания термодинамических свойств объемных сосуществующих фаз и переходной области пар – жидкость и пар – твердое тело с плоской и искривленной границей раздела фаз, участии в апробации результатов исследования, проведении компьютерных расчетов, обработки рассчитанных данных и их анализа, проведении сопоставления расчетов с известными экспериментальными данными, подготовке публикаций к печати и докладов на конференциях.

Работа полностью соответствует требованиям пункта 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, т.к. в ней решены задачи по моделированию малых систем и расчету их

физико-химических характеристик на базе молекулярной теории, позволяющей учесть вклад от переходных областей на границе раздела фаз с неоднородными молекулярными распределениями в термодинамические свойства систем.

На заседании 5 апреля 2018 г. диссертационный совет принял решение присудить Зайцевой Е.С. ученую степень кандидата физико-математических наук. При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 29 человек, из них 7 докторов наук по специальности 02.00.04 – физическая химия, участвовавших в заседании, из 39 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за- 29 против –нет, недействительных бюллетеней –нет.

Зам. председателя диссертационного совета
доктор химических наук

В.В.Арсланов

Ученый секретарь диссертационного совета
кандидат химических наук

Н.П.Платонова

6 апреля 2018 г.