

ОТЗЫВ

председателя диссертационного совета на диссертацию Копаничука Ильи Владимировича на тему: «Компьютерное моделирование ионных и неионных обратных мицелл», представленную на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Мицеллообразование – яркий пример самоорганизации молекул поверхностно-активных веществ (ПАВ), перевернувший наши представления о растворителях и нашедший широкие применения в технологиях очистки, разделения веществ и синтеза наночастиц. Взаимодействия молекул ПАВ и растворителя, молекул ПАВ и агрегатов ПАВ, самих агрегатов ПАВ определяют равновесные состояния, механизмы и кинетику агрегации и релаксации мицелл. Однако термодинамическая и кинетическая теория молекулярных механизмов агрегации и распада мицелл (особенно обратных мицелл) разработана недостаточно на сегодняшний день. Понимание этих механизмов и кинетических закономерностей открывает новые возможности для управления и создания мицеллярных систем различного назначения.

Диссертационная работа И.В. Копаничука посвящена исследованию обратных мицелл ионных и неионных ПАВ в неполярных растворителях в присутствии воды и различных органических добавок методом молекулярной динамики. На сегодняшний день возможности прямого лабораторного эксперимента в исследовании детальной структуры ядра и короны обратных мицелл с солюбилизатором остаются сильно ограниченными, и компьютерное моделирование обратных микроэмульсий оказывается незаменимым инструментом детального анализа таких систем. Это обуславливает актуальность данной диссертации. Научная активность различных исследовательских групп в мире, работающих в поле компьютерного молекулярного моделирования обратных мицелл и микроэмульсий сегодня довольно высока, и в последние годы публикуется значительное количество работ по этой тематике. Новизна исследования в данной диссертации состоит в применении объединенно-атомного подхода и в полученных результатах.

В диссертации И.В. Копаничука представлены результаты по молекулярно-динамическому моделированию обратных мицелл АОТ, СПЭН 80 и ТВИН 80 с добавками различных солей и органических веществ. Работа (общим объемом в 215 м.с., на русском языке – 109 м.с., английская копия – 106 м.с.) состоит из Введения, 6 глав, Основных результатов, Выводов и Списка литературы. Список литературы включает 114 пунктов. Замечаний по оформлению диссертации не имею.

Вх, N 09/2-393 от 16.09.2019

Основные новые результаты диссертации, имеющие значения для развития науки об обратных мицеллах, состоят в следующем:

- ✓ Разработаны модели обратных неионных мицелл ТВИН 80 и его смеси со СПЭН 80, которая позволяет описать термодинамическое поведение соответствующих обратных микроэмульсий.
- ✓ Описана внутренняя структура (по распределению плотности компонентов внутри обратных мицелл как относительно их центра, так и относительно их поверхности) и формы обратных неионных мицелл ТВИН 80, СПЭН 80 и их смеси в декане с присутствием воды при разных составах соответствующих смесей.
- ✓ Исследование формы и внутренней структуры водных и безводных «сухих» обратных ионных мицелл АОТ в изооктане, перехода к образованию сеточных структур.
- ✓ Проведен расчет численных характеристик электрических свойств (распределения электрического поля и среднего квадрата дипольного момента) ионных обратных мицелл АОТNa и АОТ2Ca в присутствии соли и без. Показано, что двойной электрический слой обратной мицеллы сосредоточен в ее поверхностном слое и характеризуется высокими значениями напряженности электрического поля; присутствие соли оказывает заметное влияние на характеристики двойного слоя.
- ✓ Выделены вклады молекул воды и ионов в средний квадрат дипольного момента ионных обратных мицелл АОТ и предложена формула, аппроксимирующая зависимость среднего квадрата дипольного момента от размера обратной мицеллы АОТ.
- ✓ Смоделирована солюбилизация бензола, пиридина и их гидроксильных производных в обратных ионных мицеллах АОТNa в изооктане и декане с водой и неионных мицеллах СПЭН 80 в декане с водой. Рассчитано распределение молекул солюбилизата в обратных мицеллах относительно центра масс мицеллы.

По материалам диссертации автор имеет 5 статей в признанных международных журналах по коллоидной и физической химии, результаты докладывались на 4 международных конференциях.

В целом, работа Копаничука Ильи Владимировича заслуживает оценки «отлично». Диссертация Копаничука Ильи Владимировича на тему: «Компьютерное моделирование ионных и неионных обратных мицелл» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 01.09.2016 № 6821/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Копаничук Илья Владимирович

заслуживает присуждения ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Председатель диссертационного совета,

доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент РАН,

заведующий кафедрой статистической физики физического факультета СПбГУ

Щекин Александр Кимович

e-mail: akshch@list.ru



/Щекин А.К./

Дата

12.09.2019