

ОТЗЫВ

Председателя диссертационного совета Дубровского Владимира Германовича на диссертацию Ерошкина Юрия Андреевича на тему «Развитие термодинамических и кинетических моделей для мицеллярных систем», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Диссертационная работа Ю. А. Ерошкина «Развитие термодинамических и кинетических моделей для мицеллярных систем» посвящена актуальной тематике развития теоретических моделей кинетики роста на различных стадиях и образования устойчивых агрегатов поверхностно активных веществ, называемых мицеллами. Такие вещества широко распространены в природе и применяются в различных физико-химических технологических приложениях, например, в мицеллярном катализе, что обуславливает практическую значимость работы.

Теоретическое моделирование процесса образования мицелл исследуется на основе бесконечномерной цепочки дискретных кинетических уравнений, называемых уравнениями Беккера-Дёринга-Зельдовича-Френкеля, с учетом закона сохранения полного числа мономеров и при различных аппроксимациях геометрии зародышей и своюодной энергии их образования. Широко используется также континуальное приближение, сводящее дискретную систему к одному уравнению в частных производных фоккер-планковского типа. Соискатель использует современные методы аналитического и численного исследования данных уравнений, включая, например, разложение по собственным функциям оператора эволюции и метод эффективного потенциала для определения спектра времен релаксации, и демонстрирует хорошее владение техникой этих вычислений. Это определяет высокий научный уровень проведенного исследования.

В работе получен ряд новых результатов, включая следующие:

- Проанализированы различные формы свободной энергии образования мицеллы и коэффициентов присоединения и предложена удобная для проведения расчетов модель свободной энергии, описывающая гладкий переход от сферической к цилиндрической геометрии агрегатов.
- Найдено решение линеаризованных уравнений Беккера-Дёринга-Зельдовича-Френкеля в виде разложения по собственным векторам оператора эволюции. В полученном решении выделены стадии сверхбыстрой, быстрой и медленной релаксации и найдены соответствующие времена релаксации.
- Получено основное уравнение быстрой релаксации, позволяющее найти времена релаксации для мицеллярной системы с произвольными моделями работы агрегации и коэффициентов присоединения методом теории возмущений.
- Основное уравнение быстрой релаксации применено для аналитических и полуаналитических расчётов спектра быстрой релаксации для систем сферических и цилиндрических агрегатов с различными моделями коэффициентов присоединения.

Данные результаты представляют большой интерес как с общетеоретической точки зрения, так и для расчета конкретных систем.

Диссертация написана хорошим языком.

По диссертации имеются следующие замечания:

1. Я не совсем согласен с видом уравнений (1.5) и (1.6), по крайней мере, это требует пояснения. Обычно в теории гомогенной нуклеации в уравнении (1.5) член $-J_1$ пишут с коэффициентом 2, $-2J_1$, с учетом необходимости двух мономеров для образования димера и выделения двух мономеров в результате распада димера. Тогда и поток J_1 можно записать в обычном виде, а не в виде (1.6).
2. Всегда ли мицеллы образуются гомогенно и в отсутствие потоков, связанных, например, с накачкой мономеров извне?
3. В диссертации практически отсутствует сравнение используемых методов и полученных результатов с результатами других подходов, которые применяют другие авторы, например, метод функции Грина для решения континуального уравнения эволюции, нелинейных замен переменных для упрощения вида континуального уравнения и сведения его решения к Гауссиану и т.д.
4. В диссертации мало отражены конкретные системы материалов, для моделирования которых можно было бы использовать полученные результаты.

Сделанные замечания имеют частный характер и не меняют общую высокую оценку работы.

На основании изложенного считаю, что диссертация Ерошкина Юрия Андреевича на тему: «Развитие термодинамических и кинетических моделей для мицеллярных систем» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Ерошкин Юрий Андреевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не обнаружены.

Председатель диссертационного совета

Д.ф.-м.н., профессор, зав.
лабораторией физики
полупроводниковых
наноструктур физического
факультета СПбГУ

В. Г. Дубровский

09 января 2023 г.