

## ОТЗЫВ

научного руководителя о выпускной квалификационной работе студентки 2 курса  
магистратуры

**Емельяновой К.А.**

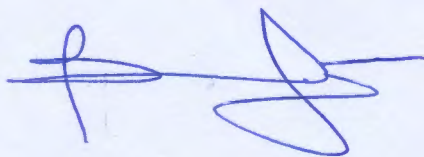
### **“Молекулярно-термодинамическое моделирование перфорации бислоя и образования пространственной сетки в растворах ионных поверхностно-активных веществ”**

Выпускная квалификационная работа Емельяновой Ксении Александровны посвящена моделированию агрегатов ионных поверхностно-активных веществ в растворе, теоретическому описанию явления смены геометрической формы стабильных агрегатов, развитию теоретических представлений о молекулярных механизмах стабилизации отверстий в бислоях и образования пространственных сеток червеобразных мицелл, наблюдаемых в экспериментах.

В ходе работы над указанной фундаментальной проблемой (имеющей и существенное практическое значение) К.А.Емельянова овладела современными молекулярно-термодинамическими методами моделирования мицеллярных растворов ПАВ и сформулировала новую версию модели, обладающую более широкими возможностями. К.А.Емельянова освоила программирование и разработала вычислительные алгоритмы; написала и отладила программы на языке ФОРТРАН. Научилась квалифицированно пользоваться весьма сложным программным комплексом COMSOL MULTIPHYSICS. К.А.Емельянова сумела дать ясную физико-химическую интерпретацию всем полученным новым результатам. Эти новые результаты К.А.Емельянова весьма успешно представила на крупных международных симпозиумах, в том числе в качестве устного доклада на Европейском симпозиуме по прикладной термодинамике ESAT2017, а часть этих результатов опубликовала в журнале Американского химического общества J of Chemical & Engineering Data. Емельянова К.А. зарекомендовала себя очень вдумчивым, ответственным, исполнительным и инициативным работником. Обладает прекрасными коммуникативными качествами.

Считаю, что выпускная работа Емельяновой К.А. “Молекулярно-термодинамическое моделирование перфорации бислоя и образования пространственной сетки в растворах ионных поверхностно-активных веществ” заслуживает оценки «отлично».

Научный руководитель



д.х.н, проф. Викторов А.И.