

УТВЕРЖДАЮ:



И. о. директора ФИЦ ХФ РАН

д. ф.-м. н. Чертович А. В.

«25» февраля
Чертович

2024г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН).

Диссертация «Моделирование реологических эффектов и кинетики радикальной полимеризации при течении многофазных неньютоновских жидкостей в микроканалах» выполнена в лаборатории физики и механики полимеров отдела полимеров и композиционных материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН).

В период подготовки диссертации соискатель Роцин Дмитрий Евгеньевич обучался в аспирантуре Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, с 2020 года соискатель работал в лаборатории Неорганических и гибридных полимеров и композитов в должности младшего научного сотрудника, а с 2023 год по настоящее время – в лаборатории физики и механики полимеров ФИЦ ХФ РАН в должности научного сотрудника.

В 2020 г. окончил Московский физико-технический институт по специальности «Прикладные математика и физика» (03.04.01).

Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2024 году Федеральным государственным бюджетным учреждением науки Федеральным исследовательским центром химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук.

Научный руководитель – Патлажан Станислав Абрамович, доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник отдел полимеров и композиционных

материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

Целью диссертационной работы Рощина Д.Е. было исследование взаимосвязи реологических свойств псевдопластичных полимерных сред с особенностями течения одно- и двухфазных неньютоновских жидкостей в микроканалах, а также влияния течения на кинетику свободно-радикальной полимеризации в микрокапле при инициировании на границе раздела фаз.

Диссертация соответствует специальности 1.4.7. «Высокомолекулярные соединения» (пункту 6 паспорта специальности - «решение теоретических задач, связанных с моделированием молекулярной и надмолекулярной структуры олигомеров, полимеров и сополимеров в растворах, расплавах и полимерных твердых тел в аморфном, полукристаллическом и кристаллическом состояниях»)

Актуальность диссертационной работы обусловлена важностью микрожидкостных технологий для миниатюризации многих физико-химических процессов и синтеза широкого спектра полимерных микрочастиц с заданными свойствами. Для реализации таких процессов необходимо глубокое понимание особенностей течения многофазных неньютоновских жидкостей в микроканалах, а также кинетики протекания полимеризации в микрокаплях. Среди наиболее актуальных можно выделить следующие задачи: 1) исследование условий нарушения устойчивости течения псевдопластичных полимерных сред в микроканалах с резким сужением и расширением и взаимосвязь бифуркации размеров вихрей с гидродинамическим сопротивлением таких каналов, 2) определение зависимости времени смешения совместимых жидкостей внутри микрокапли в процессе ее течения в микроканале от реологических свойств сплошной среды жидкости, скорости ее течения и параметра конфайнмента, 3) изучение влияния размера капли и скорости сплошной среды на кинетику свободно-радикальной полимеризации в микрокапле при инициировании на границе раздела фаз. Отмеченные задачи и их последовательное решение составляют основу диссертации Рощина Д.Е.

Личный вклад автора. Рощин Д.Е. принимал участие в обсуждении постановок задач, планировании и проведении всего объема численного моделирования, в научном анализе полученных результатов, их оформлении, а также написании научных статей и тезисов докладов.

Достоверность научных результатов, полученных в диссертационной работе, обеспечена применением современных методов математического моделирования, оптимизацией расчетных сеток, а также убедительно доказана путем сравнительного анализа полученных численных решений с известными экспериментальными данными и теоретическими результатами. Сделанные выводы полностью аргументированы, а выполненный объем исследований в полной мере достаточен для обоснования основных положений, выносимых на защиту.

Научная новизна диссертационной работы Рощина Д.Е. определяется комплексом проведенных оригинальных исследований и полученных результатов. Впервые установлена зависимость критического числа Рейнольдса бифуркационного перехода при течении псевдопластичной полимерной жидкости в каналах с резким сужением и расширением от реологических характеристик модели Карро-Ясуда и геометрических параметров канала, а также выявлена немонотонная зависимость гидродинамического сопротивления от числа Рейнольдса. Впервые показано, что время смешения совместимых жидкостей в микрокапле, как функция числа Пекле, существенно зависит от реологических свойств сплошной среды и от параметра конфайнмента микроканала. Методами численного моделирования впервые исследованы закономерности свободно-радикальной полимеризации внутри микрокапли при инициировании на границе раздела фаз. Установлено, что в зависимости от размера капли реакция радикальной полимеризации в ней может протекать в двух режимах – кинетическом, когда константа скорости совпадает с квазистационарным приближением (для капель микронного размера) и в диффузионно-кинетическом режиме (для больших капель), когда эффективная константа скорости спадает степенным образом при увеличении радиуса капли. В диссертации изучено влияние радиуса капли и скорости сплошной среды на среднюю длину макромолекул и степень полидисперсности. Показано, в частности, что в очень малых каплях возможно образование олигомерных молекул.

Практическая значимость диссертационной работы Рощина Д. Е. состоит в том, что полученные результаты могут быть использованы при проектировании микрожидкостных устройств, предназначенных, в частности, для синтеза полимерных микрочастиц. Выявленная немонотонная зависимость гидродинамического сопротивления от числа Рейнольдса для псевдопластичных растворов полимеров при течении в каналах с резким сужением и расширением позволит определять критическое число Рейнольдса бифуркационных переходов по зависимости гидродинамического давления от расхода жидкости, что гораздо проще и дешевле, чем при помощи метода велосиметрии

микрочастиц. Обнаруженное в малых каплях формирование коротких полимерных цепей может служить основой для создания нового метода синтеза олигомеров.

Полнота изложения и апробация диссертационной работы.

Основные результаты обсуждались на 12 всероссийских и международных научных конференциях. Результаты диссертационной работы полностью отражены в 6 статьях в журналах, входящих в перечень ВАК и индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus:

1. **Roshchin D. E.**, Kravchenko I.V., Fu T., Patlazhan S. A. Effect of flow bifurcation transitions of shear-thinning fluids on hydrodynamic resistance of channels with sudden contraction and expansion. // *Chemical Engineering Science*. – 2023. – V. 281. – P. 119169.
2. **Roshchin D.E.**, Patlazhan S.A., Berlin A.A. (2023). Free-radical polymerization in a droplet with initiation at the interface. // *European Polymer Journal*. – 2023. – V. 190. – P. 112002.
3. **Roshchin D.E.**, Patlazhan S.A. Mixing inside droplet co-flowing with Newtonian and shear-thinning fluids in microchannel. // *International Journal of Multiphase Flow*. – 2023. – V. 158. – P. 104288.
4. **Roshchin D.E.**, Patlazhan S.A., Berlin A.A. Modeling of Free-Radical Polymerization under Periodic Photoinitiation. // *Polymer Science, Series B*. – 2022. – V. 64. – P. 78–87.
5. **Roshchin D.E.**, Kravchenko I.V., Patlazhan S.A. Flow bifurcation transitions of inelastic shear thinning fluids in a channel with sudden contraction and expansion. // *Journal of Physics: Conference Series*. – 2020. – V. 1556. – P. 012060.
6. Patlazhan S.A., **Roshchin D.E.**, Kravchenko I.V., Berlin, A.A. Flow Bifurcations of Shear-Thinning Fluids in a Channel with Sudden Contraction and Expansion. // *Russian Journal of Physical Chemistry, Series B*. – 2019. – V. 13. – P. 842–848.

За время обучения в аспирантуре трижды становился победителем конкурса именных стипендий для молодых ученых ФИЦ ХФ РАН, получая стипендию имени академика Н. Н. Семенова в 2021, 2022 и 2023 году.

Диссертация «Моделирование реологических эффектов и кинетики радикальной полимеризации при течении многофазных неньютоновских жидкостей в микроканалах» Рощина Дмитрия Евгеньевича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.4.7. «Высокомолекулярные соединения».

Заключение принято на заседании Ученого совета отдела полимеров и композиционных материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук.

Присутствовали на заседании 17 членов совета Результаты голосования «за» – 17 членов совета, «против» – 0, «воздержался» – 0, протокол № 12 от «14» декабря 2023 г.

Секретарь секции № 7
ученого совета ФИЦ ХФ РАН
к.х.н., доц.



Кузнецова О.П.