

Сорина Полина Олеговна



В 2021 году окончила Институт химии СПбГУ, получив степень бакалавра. С 2018 года участвовала в научной работе на кафедре физической химии. Научный руководитель: д.х.н., профессор Викторов А.И., группа «Физическая химия мягкой материи».

Выпускная квалификационная работа: *«Молекулярно-термодинамическое моделирование образования везикул в водно-солевых растворах ионных поверхностно-активных веществ»*. В рамках данной работы было впервые получено аналитическое выражение для трансмембранного потенциала везикулы в приближении линеаризованного уравнения Пуассона-Больцмана и исследована его зависимость от параметров системы. Значительная часть исследования была посвящена разработке вычислительного алгоритма и программного обеспечения на языке FORTRAN, позволяющих решать уравнение материального баланса для известной суммарной брутто-концентрации двух ПАВ с учетом агрегативного равновесия в растворе, включающем монодисперсные сферические мицеллы, полидисперсные стержнеобразные мицеллы и полидисперсные везикулы. Для расчета стандартной свободной энергии агрегации использовалась классическая модель Нагаражана-Рукенштейна, при этом электростатический вклад был модифицирован с учетом полученного выражения для трансмембранного потенциала. С помощью разработанного программного обеспечения проведены расчеты для смесей классических ПАВ, выявлены закономерности, влияющие на размеры агрегатов, проведено сопоставление результатов с экспериментальными данными.

В магистратуре планируется продолжение работы в той же научной группе. Дальнейшие исследования связаны с развитием молекулярно-термодинамического моделирования образования мицеллярных агрегатов с использованием квазихимического приближения для учета локальных неоднородностей в системе.