



Math-Net.Ru

All Russian mathematical portal

M. E. Voronin, N. N. Gavrilova, È. M. Koltsova, A. V. Zhensa, Simulation of aggregation process in cerium and zirconium dioxide nanoparticles, *Comp. nanotechnol.*, 2022, Volume 9, Issue 3, 73–79

DOI: 10.33693/2313-223X-2022-9-3-73-79

Use of the all-Russian mathematical portal Math-Net.Ru implies that you have read and agreed to these terms of use

<http://www.mathnet.ru/eng/agreement>

Download details:

IP: 18.97.9.170

February 10, 2025, 10:10:33



05.13.18

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ,  
ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И КОМПЛЕКСЫ ПРОГРАММ  
MATHEMATICAL MODELING, NUMERICAL METHODS  
AND COMPLEX PROGRAMS**

DOI: 10.33693/2313-223X-2022-9-3-73-79

## Моделирование агрегации наночастиц диоксидов церия и циркония

М.Э. Воронин<sup>a</sup> ©, Н.Н. Гаврилова<sup>b</sup> ©, Э.М. Кольцова<sup>c</sup> ©, А.В. Женса<sup>d</sup> ©

Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева,  
г. Москва, Российская Федерация

<sup>a</sup> E-mail: mvoroninmsc@gmail.com

<sup>b</sup> E-mail: gavrilova.n.n@muctr.ru

<sup>c</sup> E-mail: koltsova.e.m@muctr.ru

<sup>d</sup> E-mail: zhensa.a.v@muctr.ru

**Аннотация.** Проведено исследование агрегативной устойчивости системы  $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$  в различных диапазонах pH среды. Для создания математической модели устойчивости агрегатов была взята обобщенная теория ДЛФО. Определены параметры структурной составляющей потенциальной энергии взаимодействия частиц с помощью принципа минимума производства энтропии. Определены предельные размеры частиц агрегативно устойчивой системы.

**Ключевые слова:** ядро коагуляции, принцип минимума производства энтропии, агрегативная устойчивость, оксиды

**Благодарности.** Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 20-07-00886.

ССЫЛКА НА СТАТЬЮ: Воронин М.Э., Гаврилова Н.Н., Кольцова Э.М., Женса А.В. Моделирование агрегации наночастиц диоксидов церия и циркония // Computational nanotechnology. 2022. Т. 9. № 3. С. 73–79. DOI: 10.33693/2313-223X-2022-9-3-73-79

DOI: 10.33693/2313-223X-2022-9-3-73-79

## Simulation of Aggregation Process in Cerium and Zirconium Dioxide Nanoparticles

M.E. Voronin<sup>a</sup> ©, N.N. Gavrilova<sup>b</sup> ©, E.M. Koltsova<sup>c</sup> ©, A.V. Zhensa<sup>d</sup> ©

Mendeleev University of Chemical Technology of Russia,  
Moscow, Russian Federation

<sup>a</sup> E-mail: mvoroninmsc@gmail.com

<sup>b</sup> E-mail: gavrilova.n.n@muctr.ru

<sup>c</sup> E-mail: koltsova.e.m@muctr.ru

<sup>d</sup> E-mail: zhensa.a.v@muctr.ru

**Abstract.** A study of the aggregative stability of the  $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$  system was carried out in various pH ranges of the medium. To create a mathematical model of the stability of aggregates, the generalized DLVO theory was taken. The parameters of the structural component of the potential energy of particle interaction are determined using the principle of minimum entropy production. The limiting particle sizes of an an aggregatively stable system are determined.

**Key words:** coagulation kernel, principle of minimum entropy production, aggregative stability, oxides

**Acknowledgments.** The reported study was funded by RFBR, project No. 20-07-00886.

FOR CITATION: Voronin M.E., GavriloVA N.N., KoltsoVA E.M., Zhensa A.V. Simulation of Aggregation Process in Cerium and Zirconium Dioxide Nanoparticles. *Computational Nanotechnology*. 2022. Vol. 9. No. 3. Pp. 73–79. (In Rus.) DOI: 10.33693/2313-223X-2022-9-3-73-79

## ВВЕДЕНИЕ

Диоксиды металлов церия и циркония нашли широкое применение в множестве областей: при получении пленок, покрытий и различных катализаторов, в стекольной и керамической промышленности. Благодаря уникальным окислительно-восстановительным свойствам [Trovarelli, 1996], способности образовывать твердые растворы, повышенной механической прочности и термической устойчивости эти системы привлекают внимание инженеров-исследователей. Наиболее распространенным методом получения оксидов  $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$  является золь-гель-метод. С целью получения и синтеза катализаторов, наноматериалов необходимо добиться агрегативно устойчивых зольей  $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$ , содержащих наночастицы. В данной работе проведены экспериментальные исследования по получению зольей  $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$  и изучению их агрегативной устойчивости при изменении pH в диапазоне 0,5–6. Агрегативную устойчивость зольей  $\text{CeO}_2\text{-ZrO}_2$  исследовали также с привлечением методов математического моделирования, термодинамики необратимых процессов, обобщенной теории ДЛФО (Дерягин, Ландау, Фервей, Овербек). Классическая теория ДЛФО обязана своему названию ученым Б.В. Дерягину, Л.Д. Ландау, Е. Фервею и Т. Овербеку [Derjaguin, Landau, 1941; Verwey, Overbeek, 1955]. Основная идея теории заключается в том, что при перекрытии поверхностных слоев, окружающих частицы, связанном с уменьшением толщины прослойки между частицами, возникает расклинивающее давление – суммарный параметр, учитывающий силы притяжения и отталкивания в зоне перекрытия и влияющий на агрегативную устойчивость.

Цель данной работы – провести математическое моделирование процесса агрегации наночастиц в системе диоксидов церия и циркония с целью определения неизвестных параметров структурной составляющей расклинивающего давления частиц, а также определение кинетики агрегации.

## МЕТОДЫ

Классическая теория агрегативной устойчивости ДЛФО [Derjaguin, Landau, 1941, Verwey, Overbeek, 1955] учитывает две составляющие расклинивающего давления: молекулярную, вызванную действиями сил притяжения (ван-дер-ваальсовых сил) и электростатическую, учитывающую силы отталкивания, вызванные перекрытием двойных электрических слоев. Общий

вид энергии взаимодействия частиц в этом случае имеет вид:

$$U_1 = U_m + U_e, \quad (1)$$

где  $U_m$  – молекулярная составляющая, Дж;  $U_e$  – электростатическая составляющая, Дж.

С развитием общей теории агрегативной устойчивости росло и количество экспериментальных данных, которые иногда противоречили классической теории теории ДЛФО. В данных работах [Derjaguin., Churaev, 1977; Bhattacharjee, Elimelech, Borkovec, 1998, Churaev, 2004; Boström, Deniz, Franks, 2006] можно заметить, что наблюдаются отклонения от классической теории ДЛФО на поверхностях, расположенных друг от друга на расстоянии меньше 2–3 нм.

В работах [Derjaguin, 1979; Churaev, 1984; Derjaguin, Churaev, Muller, 1985; Derjaguin, 1986] было заявлено гипотеза о том, что существуют поверхностные силы, влияющие на структуру жидкости в перекрытии слоев. Такие прослойки назвали граничными слоями и предположили, что возникновение структурной составляющей расклинивающего давления является следствием существования данных слоев. Таким образом, суммарная энергия парного взаимодействия частиц имеет вид:

$$U_1 = U_m + U_e + U_s, \quad (2)$$

где  $U_s$  – структурная составляющая потенциальной энергии парного взаимодействия частиц, имеющая вид [10–12]:

$$U_s = \pi a K_s l^2 \exp\left(\frac{-h}{l}\right), \quad (3)$$

где  $a$  – радиус частиц, м;  $K_s$  – параметр интенсивности структурных сил, Дж/м<sup>3</sup>;  $l$  – радиус их корреляции, м;  $h$  – расстояние между частицами, м. Для параметров  $K_s$  и  $l$  на данный момент не существует точных алгоритмов расчета. В данной работе эти параметры рассчитывались с помощью принципа минимума производства энтропии.

Рассмотрим процесс агрегации частиц. Математическая модель такого процесса имеет вид [Kafarov, Dorokhov, Koltsova, 2018]:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \quad (4)$$

$$= \int_0^{r/2} K(\mu, r-\mu) f(\mu) f(r-\mu) d\mu - f(r) \int_0^\infty (\mu, r) f(\mu) d\mu;$$

$$f(t=0, r) = f^0(r), \quad (5)$$

Воронин М.Э., Гаврилова Н.Н., Кольцова Э.М., Женса А.В.

где  $f(\mu)$  – плотность функции распределения частиц по размерам;  $r, \mu$  – объемы частиц;  $t$  – время, с;  $K(\mu, r)$  – функция, которую называют константой агрегации,  $\text{м}^3/\text{с}$ ;  $f^0(r)$  – плотность распределения частиц в начальный момент времени.

Для системы, находящейся в стационарном состоянии производство энтропии минимально, то есть выполняется принцип минимума производства энтропии И. Пригожина [Koltsova, Tretyakov, Gordeev, 2001; Glansdorff, Prigogine, 2003; Prigogine, 2006; Prigogine, Stengers, 2014; Koltsova, Gordeev, 2018].

Производство энтропии системы, в которой происходит процесс агрегации равно:

$$\sigma = Y_{\text{ар}} X_{\text{ар}}, \quad (6)$$

где  $\sigma$  – производство энтропии;  $X_{\text{ар}}$  – термодинамическая движущая сила агрегации;  $Y_{\text{ар}}$  – термодинамический поток агрегации, связанные соотношением Л. Онзагера [Groot, Mazur, 1964]:

$$Y_{\text{ар}} = LX_{\text{ар}}, \quad (7)$$

где  $L$  – феноменологический коэффициент.

В [Kafarov, Dorokhov, Koltsova, 2018] движущая сила агрегации имеет вид:

$$X_{\text{ар}} = U_2 - U_1, \quad (8)$$

где  $U_1$  – потенциальная энергия взаимодействия частиц;  $U_2$  – работа внутренних сил дисперсной системы, идущая на агрегацию частиц, которая пропорциональна кинетической энергии. Учитывая, что скорость наночастиц имеет распределение по значениям, возьмем  $U_2$  в диапазоне  $10kT - 15kT$ .

Движущая сила агрегации  $X_{\text{ар}}$  нелинейно зависит от размеров частиц, от pH среды, от электрокинетического потенциала и от расстояния между частицами. В зависимости от значения расстояния между частицами сильно меняется составляющая  $U_1$  движущей силы агрегации. Поэтому для выполнения требования минимума производства энтропии необходимо выполнение условия:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial h} = 0, \quad (9)$$

$$2LX_{\text{ар}} \frac{\partial X_{\text{ар}}}{\partial h} = 0 \quad (10)$$

Данные условия в свою очередь обеспечиваются:

$$X_{\text{ар}} = U_2 - U_1, \quad (11)$$

$$\frac{\partial X_{\text{ар}}}{\partial h} = \frac{\partial U_1}{\partial h} = 0. \quad (12)$$

При достижении условия  $U_2 = \max U_1(h^*)$  движущая сила агрегации становится равна нулю. В этом случае система принимает стационарное состояние и размер частиц не меняется со временем, т.е. система становится агрегативно устойчивой.

В настоящее время существует достаточно много подходов для моделирования процесса агрегации частиц. Однако для моделирования кинетики агрегации традиционно используют теорию, разработанную польским физиком-теоретиком Марианом Смолуховским. В основе данной теории лежит тот факт, что устойчивость системы можно рассматривать как функцию, зависящую от скорости коагуляции частиц в данной системе. Под скоростью коагуляции понималось изменение концентрации частиц в единице объема в единицу времени. Коагуляция может длиться неопределенное количество времени (от нескольких минут до нескольких лет). Соответственно, чем ниже скорость коагуляции – тем система устойчивее.

Нами разработана математическая модель кинетики агрегации частиц, включающую диффузию и скорость движения частиц.

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + v \frac{\partial v}{\partial x} &= g \frac{[\rho_0^2 - \rho_0^1]}{\rho_0^2} - f_{12}; \quad (13) \\ \frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} &= \\ &= D \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \int_0^{1/\sqrt[3]{2}} K(\mu, \sqrt[3]{l^3 - \mu^3}) f(\mu) f(\sqrt[3]{l^3 - \mu^3}) d\mu - \\ &\quad - f(l) \int_0^l K(\mu, l) f(\mu) d\mu, \end{aligned}$$

где  $v$  – скорость движения частиц, м/с;  $t$  – время, с;  $x$  – высота столба жидкости, м;  $g$  – ускорение свободного падения, м/с;  $\rho_2^0$  – плотность раствора,  $\text{кг}/\text{м}^3$ ;  $\rho_1^0$  – плотность частиц,  $\text{кг}/\text{м}^3$ ;  $f(t, r)dr$  – число включений в единице объема с размерами от  $r$  до  $r + dr$ ;  $D$  – коэффициент диффузии;  $K(\mu, l)$  – константа агрегации, характеризующая вероятность агрегации частиц размерами  $\mu$  и  $l$ ;  $\mu$ -фаза – совокупность частиц, размеры которых принадлежат отрезку  $[\mu, \mu + d\mu]$ ;  $f_{12}$  – сила взаимодействия между сплошной и дисперсной фазами, Дж.

Коэффициент диффузии в уравнении рассчитывался по формуле Эйнштейна.

$$D = \frac{kT}{6\pi\eta r}, \quad (14)$$

где  $k$  – константа Больцмана, Дж/К;  $T$  – температура, К;  $\eta$  – динамическая вязкость, Па·с;  $r$  – радиус частицы.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В табл. 1–3 представлены экспериментальные данные для систем диоксида церия и циркония при достижении устойчивого состояния, соответствующего прекращению процессов агрегации. Измеряемыми параметрами являлись pH, потенциал двойного электрического слоя частиц  $\phi$  и размер частиц; расчетным – толщина двойного электрического слоя частиц  $\lambda$ .

Таблица 1

Данные для системы  $\text{CeO}_2 : \text{ZrO}_2$  (1 : 1)  
[Data for the system  $\text{CeO}_2 : \text{ZrO}_2$  (1 : 1)]

pH	Размер, нм [Size, nm]	$\phi$ , мВ [mV]	$\lambda$ , нм [nm]
1,05	3,5	12	1,07
1,50	3,9	16	1,72
2,10	4,1	18	3,43
2,35	5,0	14	4,58
2,90	4,2	12	8,63
3,50	4,6	8	17,21

Таблица 2

Данные для системы  $\text{CeO}_2 : \text{ZrO}_2$  (4 : 1)  
[Data for the system  $\text{CeO}_2 : \text{ZrO}_2$  (4 : 1)]

pH	Размер, нм [Size, nm]	$\phi$ , мВ [mV]	$\lambda$ , нм [nm]
1,05	3,2	7	1,03
1,40	3,7	13	1,53
1,97	8,2	18	2,96
2,40	13,2	22	4,85
3,05	13,2	21	10,25

Таблица 3

Данные для системы  $\text{CeO}_2 : \text{ZrO}_2$  (9 : 1)  
[Data for the system  $\text{CeO}_2 : \text{ZrO}_2$  (9 : 1)]

pH	Размер, нм [Size, nm]	$\phi$ , мВ [mV]	$\lambda$ , нм [nm]
1,05	6,2	8	1,03
1,53	12,0	12	1,78
2,05	17,0	20	3,24
2,40	23,0	29	4,85

Получив необходимые для расчетов данные, мы можем рассчитать с помощью специально написанного программного модуля недостающие параметры  $K$  и  $l$  в уравнении структурной составляющей расклинивающего давления (3).

В табл. 4 приведены средние значения подобранных параметров интенсивности  $K_s$  и длины корреляции  $l$  для каждой системы.

При увеличении доли  $\text{ZrO}_2$  в системе, значение параметра  $l$  тоже увеличивается. Так как длина корреляции действия структурных сил пропорциональна толщине сольватной оболочки частиц [Marcelja, Radic, 1976], то, был сделан вывод, что  $\text{ZrO}_2$  имеет более протяженную сольватную оболочку. Для параметра  $K_s$  удалось подобрать порядок значений  $10^6 \text{ Н/м}^2$ .

Таблица 4

Расчетные значения  $K_s$  и  $l$   
для системы  $\text{CeO}_2 : \text{ZrO}_2$  (9 : 1)  
[Calculated  $K_s$  and  $l$  for the system  $\text{CeO}_2 : \text{ZrO}_2$  (9 : 1)]

	$\text{CeO}_2$	9 : 1	4 : 1	1 : 1	1 : 4	$\text{ZrO}_2$
$K_s \cdot 10^{-6} \text{ Н/м}^2$ [ $\text{N/m}^2$ ]	4,21	4,45	6,08	4,71	5,65	4,06
$l$ , нм [nm]	1,2	1,4	1,8	1,8	1,85	2,3

По значениям подобранных параметров  $K_s$  и  $l$  для разных pH для всех систем были построены графические зависимости  $l = f(K_s)$ , которые представлены на рис. 1. Изучив кривые зависимостей был сделан вывод, что результат расчетов и характер кривых идентичен результатам, которые получены в работе [Novikova, 2016].

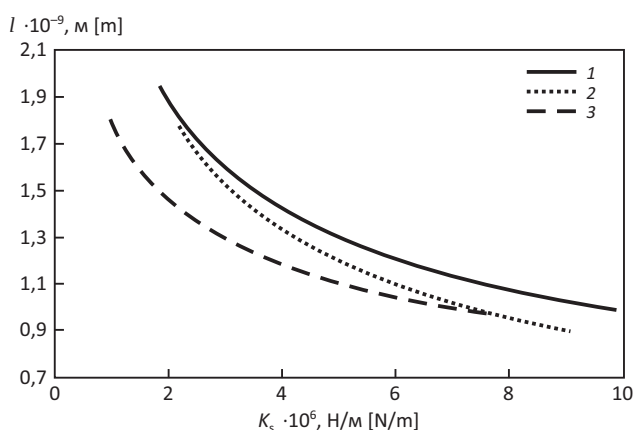


Рис. 1. Зависимость  $l$  от  $K_s$  для систем  $\text{CeO}_2 : \text{ZrO}_2$ :  
1 : 1 (1), 4 : 1 (2), 9 : 1 (3)

Fig. 1. Dependence of  $l$  on  $K_s$  for  $\text{CeO}_2 : \text{ZrO}_2$  systems:  
1 : 1 (1), 4 : 1 (2), 9 : 1 (3)

Для системы с молярным соотношением компонентов  $\text{CeO}_2 : \text{ZrO}_2$  (4 : 1) были проведены обратные расчеты. Их суть заключалась в определении предельного размера частиц при агрегации для тех значений pH, для которых эксперимент не проводился. Результаты данных расчетов приведены в табл. 5.

Для расчета кинетики агрегации использовалась разработанная математическая модель (13). Для расчета математической модели был написан специальный программный модуль. С помощью него для системы  $\text{CeO}_2 : \text{ZrO}_2$  (1 : 1) было рассчитано изменение среднего размера частиц во времени (рис. 2), результаты совпали с данными эксперимента, согласно которому после 4 суток в системе установился средний размер равный 5 нм. Из графика заметно, что на время начала эксперимента, частицы более крупного размера (3) сосредоточены на дне раствора, в то время как на поверхности (1) преобладают частицы меньших размеров. Впоследствии, частицы распределяются равномерно по всему объему жидкости.

Таблица 5

Зависимость предельного радиуса от pH  
[Dependence of particle's critical aggregation size on pH]

pH	a, нм [nm]
1,05	3,2
1,10	3,2
1,20	3,4
1,30	3,0
1,40	3,7
1,50	3,6
1,60	4,0
1,70	4,4
1,80	5,0
1,90	7,8
1,97	8,2
2,00	8,9
2,10	10,0
2,20	11,0
2,30	11,8
2,40	13,2
2,50	12,9
2,60	13,1
2,70	13,1
2,80	13,1
2,90	13,1
3,00	13,2
3,05	13,2

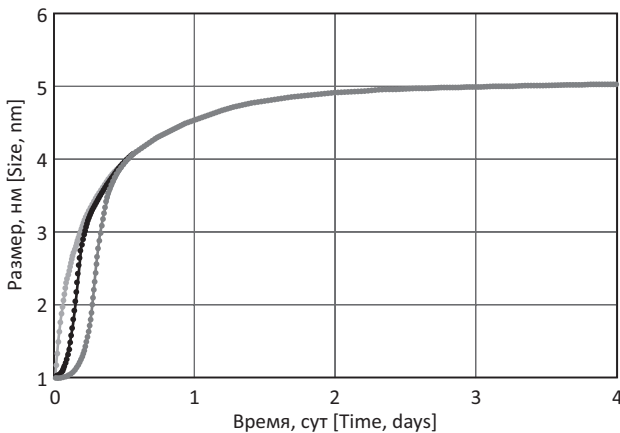


Рис. 2. Изменение среднего размера частиц с течением времени: поверхность (1), середина (2), дно (3)

Fig. 2. Change in average particle size over time: surface (1), middle (2), bottom (3)

Произведенные расчеты показали, что по истечении четырех суток, частицы распределяются по всему объему равномерно и их средний размер составляет 5,2 нм. На рис. 3 продемонстрировано распределение частиц по размерам по истечении четырех суток. Данное распределение соответствует экспериментальным данным, полученным в [Gavrilova, 2009].

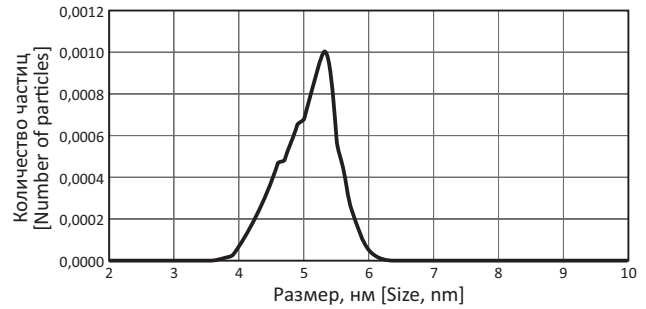


Рис. 3. Распределение частиц по размеру в системе CeO<sub>2</sub> : ZrO<sub>2</sub> 4 : 1

Fig. 3. Particle distribution by the size in the system CeO<sub>2</sub> : ZrO<sub>2</sub> 4 : 1

В ходе расчетов было подобрано значение феноменологического коэффициента  $L$  в уравнении константы агрегации для системы CeO<sub>2</sub> : ZrO<sub>2</sub> = 1 : 1. Он составил  $9 \cdot 10^{-26}$ .

Данные расчеты позволили сделать вывод, что скорость движения частиц не зависит от высоты и сохраняет постоянное значение с течением времени для каждой частицы. На рис. 4 приведен график изменения скорости движения частиц в зависимости от ее размера.

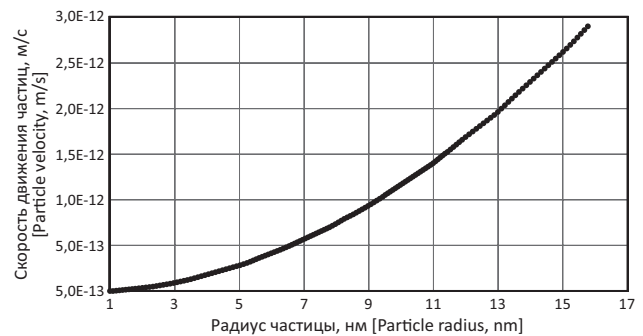


Рис. 4. Зависимость скорости движения частиц от размера  
Fig. 4. Dependence of particle velocity on size

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе впервые применен принцип минимума производства энтропии для моделирования процесса агрегации в гидрозолях диоксидов. Сформированы подходы и алгоритмы для расчета параметров структурной составляющей расклинивающего давления, а также предельного размера частиц при агрегации.

Было определены значения параметров  $K_s$  и  $l$  структурной составляющей расклинивающего давления в системе  $\text{CeO}_2 : \text{ZrO}_2$  при различных соотношениях ее компонентов (1/1, 4/1, 9/1). Была найдена зависимость между параметрами  $K_s$  и  $l$  и построены графические зависимости  $K_s$  от  $l$ . Определены пре-

дельные размеры частиц при тех значениях pH при которых не проводились экспериментальные исследования.

Впервые применена математическая модель процесса агрегации частиц учитывающая диффузию и конвекцию.

### Библиография/References

1. Trovarelli A. Catalytic properties of ceria and  $\text{CeO}_2$ -containing materials. *Catalysis Reviews*. 1996. Vol. 38. No. 4. Pp. 439–520.
2. Derjaguin B.V., Landau L.D. Theory of stability of strongly charged lyophobic sols and adhesion of strongly charged particles in electrolyte solutions. *JETP*. 1941. Vol. 11. No. 2. 802 p.
3. Verwey E.J.W., Overbeek J.T.G. Theory of the stability of lyophobic colloids. *Journal of Colloid Science*. 1955. Vol. 10. No. 2. Pp. 224–225.
4. Bhattacharjee S., Elimelech M., Borkovec M. DLVO Interaction between colloidal particles: Beyond Derjaguin's approximation. *Croatica Chemica Acta*. 1998. Vol. 71. No. 4. Pp. 883–903.
5. Boström M., Deniz V., Franks G.V., Ninham B.V. Extended DLVO theory: Electrostatic and non-electrostatic forces in oxide suspensions. *Chemical Advances in Colloid and Interface Science*. 2006. Vol. 123–126. Pp. 5–15.
6. Derjaguin B.V., Churaev N.V. Structural component of disjoining pressure of thin layers of liquids. *Croat. Chem. Acta*. 1977. Vol. 50. No. 1–4. P. 187. (In Rus.)
7. Churaev N.V. Surface forces and physicochemistry of surface phenomena. *Russian Chemical Reviews*. 2004. Vol. 73. No. 1. Pp. 25–36. (In Rus.)
8. Deryagin B.V. Theory of stability of colloids and thin films. Moscow: Nauka, 1986. 206 p.
9. Deryagin B.V., Churaev N.V., Muller V.M. Surface Forces. 1985. 220 p.
10. Derjaguin B.V. Stability of colloidal systems. *Advances in Chemistry*. 1979. Vol. 48. No. 4. Pp. 675–721. (In Rus.)
11. Churaev N.V., Derjaguin B.V. Inclusion of structural forces in the theory of stability of colloids and films. *Journal of Colloid and Interface Science*. 1985. Vol. 103. No. 2. Pp. 542–553. (In Rus.)
12. Golikova E.V. The role of boundary layers of water in the stability of disperse systems: Dis. ... Cand. of Sci. (Chem.). 2004. 436 p.
13. Kafarov V.V., Dorokhov I.N., Koltsova E.M. System analysis of chemical technology processes: Mass crystallization. Moscow: Yurayt Publishing House, 2018. 368 p.
14. Prigozhin I., Stengers I. Order out of chaos. Man's new dialogue with nature. Transl. from Eng. 2014. 304 p.
15. Prigozhin I. From existing to emerging. 2006. 291 p.
16. Glensdorf P., Prigozhin I. Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuations. 2003. 280 p.
17. Koltsova E.M., Gordeev L.S. Synergetics in chemistry and chemical technology. Moscow: Yurayt Publishing House, 2018. 295 p.
18. Koltsova E.M., Tretyakov Yu.D., Gordeev L.S., Vertegel A.A. Nonlinear dynamics and thermodynamics of irreversible processes in chemistry and chemical technology. Moscow: Khimiya, 2001.
19. De Groot S.R., Mazur P. Non-equilibrium thermodynamics. Courier Corporation, 2013.
20. Kafarov V.V., Dorokhov I.N., Koltsova E.M. System analysis of chemical technology processes: Methods of non-equilibrium thermodynamics. Moscow: Yurayt Publishing House, 2018. 367 p.
21. Marcelja S., Radic N. Repulsion of interfaces due to boundary water. *Chem. Phys. Lett*. 1976. Vol. 42. No. 1. P. 129.
22. Novikova N.A. Kinetics of coagulation of monodisperse silica sol in electrolyte: Dis. ... Cand. of Sci. (Chem.). 2016. 143 p.
23. Gavrilova N.N. Synthesis and colloid-chemical properties of  $\text{CeO}_2$ - $\text{ZrO}_2$  hydrosols: Dis. ... Cand. of Sci. (Chem.). 2009. 146 p.

Статья проверена программой Антиплагиат. Оригинальность – 80,92%

Рецензент: Глебов М.Б., доктор технических наук, профессор; заведующий кафедрой химико-технологических процессов Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева

Статья поступила в редакцию 14.08.2022, принята к публикации 26.09.2022

The article was received on 14.08.2022, accepted for publication 26.09.2022

### Сведения об авторах

**Воронин Михаил Эдуардович**, аспирант кафедры информационных компьютерных технологий Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева. Москва, Российская Федерация. E-mail: mvoroninmsc@gmail.com

**Гаврилова Наталья Николаевна**, доктор химических наук, доцент; профессор кафедры коллоидной химии Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева. Москва, Российская Федерация. Author ID: 292846; E-mail: ngavrilova@muctr.ru

### ABOUT THE AUTHORS

**Mikhail E. Voronin**, postgraduate student at the Department of Information Computer Technologies of the Mendeleev University of Chemical Technology of Russia. Moscow, Russian Federation. E-mail: mvoroninmsc@gmail.com

**Natalia N. Gavrilova**, Dr. Sci. (Chem.), Associate Professor; associate professor at the Department of Colloid Chemistry of the Mendeleev University of Chemical Technology of Russia. Moscow, Russian Federation. Author ID: 292846; E-mail: ngavrilova@muctr.ru

**Воронин М.Э., Гаврилова Н.Н., Кольцова Э.М., Женса А.В.**

**Кольцова Элеонора Моисеевна**, доктор технических наук, профессор; заведующая кафедрой информационных компьютерных технологий Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева. Москва, Российская Федерация. Author ID: 8352; E-mail: koltsova.e.m@muctr.ru

**Женса Андрей Вячеславович**, кандидат технических наук, доцент; доцент кафедры информационных компьютерных технологий Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева. Москва, Российская Федерация. Author ID: 51935; E-mail: zhensa.a.v@muctr.ru

**Eleonora M. Koltsova**, Dr. Sci. (Eng.), Professor; Head at the Department of Information Computer Technologies of the Mendeleev University of Chemical Technology of Russia. Moscow, Russian Federation. Author ID: 8352; E-mail: koltsova.e.m@muctr.ru

**Andrey V. Zhensa**, Cand. Sci. (Eng.), Associate Professor; associate professor at the Department of Information Computer Technologies of the Mendeleev University of Chemical Technology of Russia. Moscow, Russian Federation. Author ID: 51935; E-mail: zhensa.a.v@muctr.ru