

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

о работе Хлюпина Алексея Николаевича по диссертации

«Применение теории случайных процессов и полей для описания термодинамических свойств флюида при взаимодействии с геометрически гетерогенными поверхностями», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 - теоретическая физика

Диссертация Хлюпина А.Н. посвящена актуальной проблеме исследования влияния свойств случайной геометрии поверхностей материалов на физические свойства молекулярного флюида, находящегося с ней в контакте. Основная проблема существующих подходов к моделированию свойств поверхностного флюида на наномасштабе (на примере адсорбции) – упрощенные модели неоднородной поверхности материалов. Существующие эффективные и быстрые методы на основе теории функционала плотности пренебрегают латеральными возмущениями поверхности. Методы атомистического моделирования, такие как методы молекулярной динамики или Монте-Карло симуляции ограничены вычислительными мощностями и способны эффективно моделировать системы лишь с относительно небольшими поверхностными дефектами. В тоже время экспериментальные исследования многих реальных материалов свидетельствуют о том, что их поверхности на молекулярном масштабе могут быть сильно гетерогенными и шероховатыми. Таким образом, остро стоит проблема разработки теоретического инструмента для описания и моделирования таких систем

Данная задача лежит на стыке статистической физики, физической химии и теории случайных процессов. Алексей в процессе работы успешно погрузился в данные направления и нашел оригинальное решение поставленной задачи. В диссертации последовательно развивается и усложняется теоретический подход к описанию свободной энергии молекул флюида при взаимодействии с геометрически неоднородной поверхностью на основе модели гауссовских случайных полей, Марковских случайных процессов и случайных ветвящихся графов. В финальной главе разработанные теоретические модели эффективного потенциала взаимодействия используются для построения нового вычислительного метода на основе классической теории функционала плотности. Метод был апробирован и показал эффективность в задачах низкотемпературной адсорбции простых газов в материалах на основе углерода.

Диссертационная работа содержит ряд новых результатов. Полное соответствие проведенных исследований мировому уровню подтверждают вошедшие в диссертацию работы, опубликованные в ведущих научных журналах, индексируемых

библиометрическими базами Web of Science и Scopus и входящих в перечень изданий, рекомендованных ВАК. Кроме вошедших в диссертацию публикаций, еще две работы подготовлены и находятся на стадии рассмотрения в издательствах. Кроме того, Алексей продолжает активно участвовать в дальнейшем развитии научных исследований по теме диссертации.

Я знаком с А.Н. Хлюпиным с момента его поступления в магистратуру МФТИ в 2013 году. С этого момента кроме обучения в университете он начал вести исследовательскую деятельность в Московском научно-исследовательском центре Шлюмберже под моим руководством, а затем в 2015 году продолжил работу в качестве аспиранта МФТИ.

За это время Алексей усвоил большой объем новых знаний и успешно погрузился в ряд задач, начиная с мультифрактального анализа гетерогенных неупорядоченных сред и заканчивая статистической физикой поверхностного флюида. В процессе исследовательской деятельности проявились положительные качества Алексея: самостоятельность, работоспособность, инициативность, умение не только решать поставленную задачу, но и сформулировать новую актуальную проблему.

Считаю, что диссертационная работа Хлюпина Алексея Николаевича удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатской диссертации, а ее автор является квалифицированным специалистом и достоин присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

31 октября 2019

Научный руководитель,

Динариев Олег Юрьевич,

кандидат физико-математических наук,

главный научный сотрудник Московского научно-исследовательского центра Шлюмберже.

Контактная информация: ODinariiev@slb.com

Динариев О.Ю.

Подпись и сведения заверяю

Специалист службы управления персоналом

Московского научно-исследовательского центра Шлюмберже



Н.В. Костецкая