

Заключение по содержанию диссертации

Рыжова Валентина Николаевича
(Ф.И.О. члена диссертационного совета)

ФИО соискателя: Хлюпин Алексей Николаевич

Название диссертации: «Применение теории случайных процессов и полей для описания термодинамических свойств флюида при взаимодействии с геометрически гетерогенными поверхностями»

Научная специальность: 01.04.02 – Теоретическая физика

Ученая степень, на соискание которой представлена диссертация: кандидат физико-математических наук

Дата защиты 14.03.2020

Оценка соответствия диссертации требованиям Положения о присуждении ученых степеней кандидата наук, доктора наук в МФТИ (далее - Положение):

1. Актуальность тематики диссертации:

Диссертация Хлюпина А.Н. посвящена изучению влияния геометрии поверхности на термодинамические свойства адсорбированного флюида. Несмотря на то, что исследования в данном направлении ведутся уже на протяжении довольно долгого промежутка времени, в этой сфере до сих пор присутствует большое количество «белых пятен». Нельзя не отметить, что необходимость в полном понимании влияния поверхностей на свойства флюида является неоспоримой, поскольку данное понимание является важнейшим фактором для корректного решения ряда прикладных задач, возникающих в различных технических областях. К таковым относится, к примеру, описание поведения флюидов в порах, размеры которых измеряются в нанометрах, что в настоящий момент вызывает бурный научный интерес в связи с введением в разработку нетрадиционных запасов нефти и газа. На сегодняшний день основная проблема в данной области состоит в том, что большая часть результатов в сфере взаимодействия молекул флюида и твердой неоднородной поверхности получена с помощью методов численного моделирования, которые требуют больших вычислительных мощностей и в силу данного аспекта рассматривают лишь упрощенные геометрические модели шероховатости, в то время как реальные материалы представляют собой намного более сложные структуры. В настоящей диссертации представлены разработанные автором новые теоретические подходы, которые позволяют преодолеть ограничения, присущие существующим методам и достоверно описать экспериментально наблюдаемые явления. Таким образом, тематику данной работы безусловно можно отнести к одной из наиболее актуальных в современной физической химии поверхностных явлений.

2. Научная новизна выносимых на защиту результатов:

В данном диссертационном исследовании модифицирован метод теории функционала плотности (DFT) для моделирования равновесного распределения флюида при контакте с шероховатыми поверхностями на молекулярном и нано масштабе. Идеи применения теории случайных Марковских процессов для построения модели эффективного потенциала взаимодействия флюид-поверхность представляют собой новый, нестандартный подход для данной области физики и также обосновывает научную новизну данной работы. Хочется отметить, что работоспособность предложенного метода подтверждена сравнением моделирования с экспериментами по адсорбции аргона, азота,

гексана (результаты опубликованы автором в полной мере), что позволяет считать полученные в работе результаты достоверными. Кроме того, к научной новизне данной диссертации можно отнести тот факт, что разработанный автором теоретический аппарат может быть применен для восстановления параметров неоднородных поверхностей по результатам экспериментов, что открывает широкие возможности для практического применения разработанной автором новой методики.

3. Теоретическая и практическая значимость диссертационной работы:

Теоретическая значимость разработанной автором модели в данной диссертации не вызывает вопросов. Хлюпину А.Н. удалось аналитически описать эффекты, которые ранее были получены только путем компьютерного моделирования, что неизбежно связано с высокими вычислительными затратами и существенным ограничением множества неоднородных поверхностей, доступных для численного моделирования. Практическая значимость работы заключается в потенциальной возможности описания широкого круга реальных неоднородных поверхностей и свойств поверхностного флюида с использованием разработанной модификации метода функционала плотности в теории жидкостей для исследования гетерогенных поверхностей (метод RSDFT), а также в практическом применении результатов работы для решения как прямой задачи, так и обратных задач восстановления свойств поверхности. Кроме того, стоит отметить, что практическое применение не ограничено задачами, детально рассмотренными в настоящей диссертации (а именно, адсорбционными явлениями). Результаты работы могут быть расширены и приложены к решению таких актуальных задач науки о поверхностях, как изучение оптимальной конструкций материалов на наномасштабе для задач хранения газов; описание конкурентной адсорбции и смачивания многокомпонентной жидкости.

4. Полнота опубликования основных результатов диссертации в рецензируемых научных изданиях в соответствии с требованиями Положения:

Диссертационная работа содержит много новых результатов, которые были опубликованы в 6 статьях в журналах, индексируемых базами Web of Science и Scopus. Кроме того, результаты работы были представлены на ряде научных семинарах и российских и международных научных конференциях.

5. Вопросы и замечания (в соответствии с п. 4.13 Положения соискатель отвечает на сформулированные здесь вопросы и замечания на заседании по защите диссертации):

- В работе основной акцент сделан на мономолекулярные простые флюиды. Однако интерес также представляют сложные флюиды из молекул-цепочек, полимеры. Насколько подход, разработанный в рамках диссертации, применим к таким системам?
- В главах 2 и 3 разработана теоретическая модель взаимодействия молекулы флюида и шероховатой поверхности материала. Данный результат развивается в главе 4 для разработки новой модификации теоретического метода на основе теории функционала плотности. Возможно ли результаты глав 2 и 3 применить непосредственно в моделировании методами молекулярной динамики, по аналогии с coarse-grained потенциалами?
- Также представляет интерес изучение не только геометрической шероховатости, но и химической гетерогенности поверхностей, возникающей в неоднородных по составу материалах. Следовало бы больше внимания в диссертации уделить данному вопросу. Могут ли теоретические

модели быть модифицированы для учета различных энергий межатомных взаимодействий на поверхности?

- В работе применяется репликосимметричный подход для решения поставленных в диссертации задач. Как известно, для адекватного описания термодинамики случайных систем в рамках метода реплик приходится прибегать к нарушению репличной симметрии. Есть ли необходимость в подобном подходе в рамках данной работы.
- В обзоре метода функционала плотности не упоминается большой цикл работ по применению этого метода для описания кристаллизации.
- К сожалению, в автореферате и диссертации встречается довольно большое число опечаток.

Замечания носят рекомендательный характер и не умаляют ценности диссертационной работы.

6. Общая характеристика диссертации (не включает резолютивную часть):

Диссертация Хлюпина А.Н. производит положительное впечатление: полученные результаты математически обоснованы, достоверны и согласуются с экспериментальными данными. Автор продемонстрировал уверенное владение методами теоретической физики и вычислительными методами. Текст диссертации структурирован и грамотно написан. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации. Считаю, что диссертационная работа Хлюпина А.Н. выполнена на высоком уровне и удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатской диссертации согласно Положению о присуждении ученых степеней кандидата наук, доктора наук в МФТИ.

Дата 20 февраля 2020 года.

Подпись



(печать организации, заверяющая подпись)

/ Д.ф.-м.н., Зам. дир. ИФВД РАН
В.Н. Рыжов