

## ОТЗЫВ

научного руководителя о выпускной квалификационной работе студентки 2 курса магистратуры

**Сориной Полины Олеговны**

**“Молекулярно-термодинамическое моделирование локальной структуры в неоднородных флюидах со специфическими взаимодействиями”**

Задача теоретического описания структуры неоднородных флюидов, содержащих молекулы-цепочки является весьма актуальной и связана с необходимостью прогнозирования поведения широкого круга систем, включающего, в частности, мицеллярные растворы, микроэмульсии, мембраны и другие мезоскопические флюиды. Общая идея статистико-термодинамического описания раствора молекул-цепей, состоящая в разрезании цепи на фрагменты, сформулирована в 1970-е годы в пионерских работах Н.А.Смирновой. Позже, та же идея реализована группой американских ученых в рамках теории SAFT, которая приобрела популярность, вошла в учебники, а сравнительно недавно была распространена на разнообразные неоднородные флюиды (iSAFT). В то же время оригинальная формулировка теории Н.А.Смирновой ограничена рассмотрением плоского поверхностного слоя раствора на границе с твердой фазой и не позволяет рассмотреть другие мезоскопические флюиды.

Цель работы Сориной П.О. состояла в распространении подхода Н.А.Смирновой для описания неоднородных флюидов различной симметрии, формулировке теории и ее проверке для таких объектов.

В ходе работы над указанной фундаментальной проблемой, Сорина П.О. овладела современными методами статистической термодинамики, самостоятельно сформулировала сложную теорию неоднородных флюидов со специфическими взаимодействиями, содержащих молекулы-цепи, продемонстрировала возможности новой теории, дала ясную физико-химическую интерпретацию всем полученным результатам. Также самостоятельно Сорина П.О. разработала вычислительные алгоритмы; написала и отладила программное обеспечение для проведения расчетов.

Сорина П.О. продемонстрировала незаурядные способности к исследовательской работе, продемонстрировала себя вдумчивым, работоспособным и инициативным работником.

Считаю, что выпускная работа Сориной П.О. “Молекулярно-термодинамическое моделирование локальной структуры в неоднородных флюидах со специфическими взаимодействиями” заслуживает оценки «отлично».

Научный руководитель



дхн, проф. Викторов А.И.