

«Утверждаю»

Проректор по научной работе  
Федерального государственного  
бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования

«Санкт-Петербургский государственный университет»

С.В. Микушев

«02» марта 2020 г.



### Отзыв ведущей организации

на диссертационную работу Николая Дмитриевича Кондратюка *«Предсказание транспортных свойств углеводородов методами молекулярной динамики»*, представленную к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Диссертационная работа Николая Дмитриевича Кондратюка посвящена исследованию транспортных свойств ряда жидких углеводородов методом классической молекулярной динамики с использованием нескольких силовых полей. Достоверность полученных в работе результатов подтверждается использованием различных методов для расчета коэффициентов переноса, а также сравнением полученных результатов с экспериментальными данными. Для вычисления коэффициентов самодиффузии алканов автором применялись формулы Эйнштейна-Смолуховского и Грина-Кубо. Использованное в работе силовое поле COMPASS позволило получить близкие к экспериментальным значения коэффициентов диффузии. Автором вычислены диагональные и перекрестные вклады различных типов взаимодействий в интеграл вязкости Грина-Кубо для рассмотренных в работе углеводородных жидкостей. Предсказана зависимость коэффициента вязкости изононана от давления в диапазоне от 0.1 МПа до 1 ГПа. При этом коэффициенты вязкости при давлениях до 0.6 ГПа, полученные автором с использованием силового поля COMPASS, совпадают в пределах погрешности с опубликованными позднее экспериментальными данными. Таким образом, диссертационная работа подтверждает возможность предсказывать свойства реальных углеводородных жидкостей при помощи молекулярного моделирования.

Рассмотрение жидкостей на молекулярном уровне востребовано как в фундаментальных исследованиях, так и в инженерных задачах. **Актуальность работы** по

исследованию жидких углеводородов потенциально связана с совершенствованием методов нефтедобычи и с улучшением свойств смазочных жидкостей. Несомненным достоинством молекулярного моделирования является то, что оно позволяет полнее учесть механизмы движения и взаимодействия молекул и, в перспективе, получить возможность направленно изменять свойства таких жидкостей. При этом коэффициенты диффузии и вязкости являются одними из ключевых свойств молекулярных жидкостей, аккуратный расчет которых в большинстве случаев представляет собой крайне непростую задачу, с которой автор диссертации успешно справился.

**Практическая значимость** работы заключается в разработке вычислительных методик для получения свойств жидких углеводородов в широком диапазоне термодинамических параметров. Представленная работа заняла 2-е место на конкурсе The 10th Industrial Fluid Properties Simulation Challenge (США, 2018 г.), организованном промышленными компаниями, работающими в физико-химической области, в котором оценивалась возможность предсказания вязкости смазочных жидкостей при высоких давлениях. Значимость работы состоит в исследовании механизмов движения молекул в углеводородах, согласовании основных методов расчета коэффициентов диффузии для сложных молекулярных систем, сравнении существующих классических моделей вещества, анализе вкладов в интеграл Грина-Кубо для вязкости, интерпретации параметров аппроксимации для метода временной декомпозиции и демонстрации возможности точного расчета вязкости при высоких давлениях в рамках метода молекулярной динамики. Таким образом, практическая значимость работы не вызывает сомнений.

**Научная новизна** диссертационной работы обусловлена следующим. Автором решена проблема эквивалентности методов вычисления коэффициентов самодиффузии Эйнштейна-Смолуховского и Грина-Кубо для систем, состоящих из цепочечных молекул. Указанная проблема заключается в том, что метод Грина-Кубо систематически завышает коэффициент диффузии по сравнению с подходом Эйнштейна-Смолуховского. Разделение интеграла Грина-Кубо на численную и аналитическую части решает эту проблему. Аналитическая часть есть интеграл от гидродинамической асимптотики автокорреляционной функции скоростей молекул. Также в диссертации исследована способность наиболее распространенных силовых полей согласованно воспроизводить уравнение состояния и транспортные коэффициенты жидких алканов. Показана связь параметров аппроксимации интеграла вязкости в методе временной декомпозиции с характерными временами автокоррелятора тензора вязких напряжений.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав и заключения. Она изложена на 116 страницах машинописного текста, содержит 32 рисунка и 6 таблиц.

Библиографический список состоит из 151 работы. Работа написана понятным языком и хорошо структурирована. Рисунки представлены в достаточном количестве и хорошо иллюстрируют материал. Все это свидетельствует о высокой квалификации автора.

К основным недостаткам работы можно отнести следующее.

1. На графиках 2.3 и 2.15 приведено значительно меньше точек для силового поля COMPASS по сравнению с другими рассмотренными силовыми полями.
2. Пункт 2.7. К сожалению, в работе не было вычислено среднее расстояние между концами молекул на основе анализа молекулярно-динамических траекторий. Возможно, результат такого расчета позволил бы уменьшить погрешность при оценке сдвиговой вязкости, полученной по формуле Стокса-Эйнштейна.
3. В работе не указаны использованные вычислительные мощности и характерные времена расчетов.
4. Текст содержит небольшое количество опечаток и стилистических ошибок.

Впрочем, перечисленные выше замечания не снижают общую положительную оценку диссертации, ее актуальности, новизны, достоверности и практической значимости. Основные результаты работы представлены на множестве (более 20) международных и российских конференций и опубликованы в виде 9 статей в признанных международных и российских рецензируемых научных журналах.

Содержание автореферата соответствует диссертации.

Представленная работа полностью удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, установленным в «Положении о порядке присуждения ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 года № 842 с дополнениями от 21 апреля 2016 года № 335, а ее автор, Кондратюк Николай Дмитриевич, безусловно, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

По основным положениям своей диссертации Н.Д. Кондратюк выступил на семинаре кафедры статистической физики СПбГУ. Отзыв рассмотрен и утвержден на заседании кафедры статистической физики СПбГУ «28» февраля 2020 г. (протокол заседания №2).

Заведующий кафедрой статистической физики СПбГУ,  
чл.- корр. РАН, проф., д.ф.-м.н.



« 2 » марта 2020 г.

 А.К. Щёкин

Отзыв составил доцент кафедры статистической физики СПбГУ, кандидат физико-математических наук Н.А. Волков.

 Н.А.Волков

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет». Россия, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7–9 / Тел.: +7 (812) 36–36–636, [spbu@spbu.ru](mailto:spbu@spbu.ru).

Щёкин Александр Кимович (Санкт-Петербург, 198504, Старый Петергоф, ул. Ульяновская 1, кафедра статистической физики СПбГУ; +7 (812) 428-45-15; [a.shchekin@spbu.ru](mailto:a.shchekin@spbu.ru)).

Волков Николай Александрович (Санкт-Петербург, 198504, Старый Петергоф, ул. Ульяновская 1, кафедра статистической физики СПбГУ; +7 (812) 428-45-15; [nikolay.volkov@spbu.ru](mailto:nikolay.volkov@spbu.ru)).

ЛИЧНУЮ ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ  
НАЧАЛЬНИК ОТДЕЛА КАДРОВ №3

Н.И. М



20.03.2020