

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Кондратюка Николая Дмитриевича
«ПРЕДСКАЗАНИЕ ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ УГЛЕВОДОРОДОВ МЕТОДАМИ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ», представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
01.04.07 – физика конденсированного состояния

Компьютерное моделирование становится в последние годы важным инструментом научных исследований сложных молекулярных систем. И диссертационная работа Кондратюка Н. Д. является прекрасным примером того, как использование компьютерных методов позволяет не только количественно воспроизводить экспериментально измеряемые структурные и динамические характеристики таких систем, но и обладает предсказательным потенциалом в ситуациях, когда натурный эксперимент слишком сложен и дорог (например, при очень высоких давлениях).

Диссертация Кондратюка Н. Д. посвящена исследованию транспортных свойств углеводородов в жидком состоянии. В целом, углеводороды (алканы), являясь продуктами переработки нефти, имеют очень широкий спектр практического использования, что делает их исследование важной и актуальной задачей. Кроме того, углеводороды характеризуются сравнительно простой цепной структурой, это своего рода модельные полимеры (олигомеры), а значит их изучение имеет также и фундаментальное значение. В качестве метода исследований в работе Кондратюка Н. Д. выбран широко используемый метод молекулярной динамики, при этом в работе рассмотрены модели высокого (атомистического) разрешения.

Особый упор в диссертационной работе Кондратюка Н. Д. сделан на транспортных свойствах углеводородов в жидком состоянии. При этом при расчете коэффициента диффузии и вязкости соискатель не ограничивается одним силовым полем (моделью), как это обычно бывает в подобных работах, и повторяет расчеты с помощью нескольких полей, в том числе силовых полей класса II (COMPASS). Это позволяет провести систематическое сравнение разных силовых полей и выбрать наиболее оптимальную модель для рассматриваемого класса систем. Помимо рассмотрения различных моделей, соискатель также сравнивает разные методы расчета коэффициента диффузии и вязкости и подробно обсуждает преимущества и ограничения использованных методов. На мой взгляд эта часть работы Кондратюка Н. Д. может быть исключительно полезна для исследователей, изучающих транспортные свойства молекулярных жидкостей с помощью методов компьютерного моделирования.

В заключении хотелось бы отметить высокий научный уровень диссертационной работы Кондратюка Н. Д. Основные результаты работы опубликованы в

высокорейтинговых реферируемых журналах, что говорит о том, что диссертационная работа прошла серьезную международную экспертизу.

В целом, считаю, что диссертация Кондратюка Н. Д. является законченной научно-исследовательской работой. Ее результаты опубликованы в журналах, рекомендованных ВАК РФ. Диссертация Кондратюка Николая Дмитриевича отвечает требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, а соискатель, безусловно, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

ведущий научный сотрудник
Института высокомолекулярных соединений РАН
доктор физико-математических наук
профессор РАН
Гуртовенко Андрей Алексеевич

/ Гуртовенко А.А./

Рабочий адрес: 199004, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О. 31
Email: a.gurtovenko@biosimu.org
Тел. раб.: (812)3285601
<https://biosimu.org>

Я, Гуртовенко Андрей Алексеевич, даю согласие на использование моих персональных данных в документах, связанных с защитой диссертации Кондратюка Николая Дмитриевича, и их дальнейшей обработкой.

/ Гуртовенко Андрей Алексеевич /

Подпись сотрудника удостоверяю:

учёная секретарь Института
Скурица Ю.О.

