

«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 Максима Александровича Орехова «Влияние локальных и коллективных флуктуаций на диффузию в жидкостях», представленную к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Основной задачей диссертационной работы Максима Александровича Орехова является построение теоретического описания движения молекул и ионов в жидкости на основе разделения этого движения на локальное и коллективное. Решение этой задачи было получено на основе молекулярно-динамического моделирования жидкостей и растворов. В частности, в диссертации были рассмотрены ион в леннард-джонсовской жидкости, леннард-джонсовская жидкость, вода, ионы в воде.

Процесс диффузии в жидкостях вызывает неослабевающий интерес теоретиков и экспериментаторов как в рамках фундаментальных исследований, так и при решении **актуальных** прикладных задач, в том числе, для мицеллярных и биологических растворов. Подвижность ионов в жидкости определяет ионную проводимость растворов, характер процессов в клеточных мембранах. Проблема доставки лекарств в клетки напрямую связана с процессами диффузии. В то же время, гидратация и сольватация ионов в водных и неводных растворах делает более сложной картину диффузии ионов по сравнению с диффузией нейтральных частиц. **Актуальность темы** исследования обусловлена тем, что в настоящее время для описания диффузии в жидкостях отсутствуют общепризнанные теоретические модели, применимые для широкого класса растворов. Метод молекулярной динамики позволяет достаточно точно вычислить коэффициенты самодиффузии и диффузии в жидкостях и растворах. Однако, для достижения высокой точности необходимо

использовать сложные потенциалы межатомных взаимодействий, которые, как правило, требуют значительных вычислительных ресурсов. Это известная проблема повышения вычислительной эффективности и точности расчетов методом молекулярной динамики. Второй существенной проблемой является появляющаяся в молекулярно-динамических расчетах зависимость коэффициентов диффузии от размера вычислительной ячейки.

В диссертации не только ставится (и решается) задача аккуратного вычисления коэффициентов диффузии заряженных и нейтральных частиц различного размера при помощи метода молекулярной динамики, но и предлагается модель механизма влияния окружения этих частиц на вычисляемые коэффициенты диффузии. В диссертации отмечается, что полученные теоретические результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными других авторов. Безусловно, представляет интерес рассмотренное автором влияние размера моделируемой системы на зависимости коэффициентов диффузии ионов от их радиусов и от концентрации ионов в жидкости. Таким образом, **практическая значимость** работы не вызывает сомнений. Дополнительным фактором, увеличивающим **ценность** работы, является предложенная процедура расчета коэффициента диффузии в жидкости с использованием малого числа частиц (порядка 100) совместно с теоретической поправкой, учитывающей эффект конечного размера системы. Изложенные в диссертации результаты могут быть использованы для повышения эффективности численных методов расчета и анализа коэффициентов диффузии в жидкости. Построенная теоретическая модель диффузии в растворах может быть использована для теоретического анализа процессов переноса в электролитах, что может иметь практическое значение в связи с разработкой аккумуляторов.

Научная новизна работы обусловлена следующим. В работе показано, что на зависимости коэффициента диффузии иона в жидкости от его радиуса наблюдаются множественные максимумы, и построена теоретическая модель, описывающая данный эффект. На молекулярном уровне диффузия представляет собой случайный процесс движения частиц жидкости, т.е. диффузия связана с тепловыми флуктуациями. При этом влияние на процесс диффузии оказывают, в том числе, коллективные флуктуации, что подробно обсуждается в работе. В частности, автором построена теоретическая модель флуктуаций коэффициента самодиффузии в жидкости и показано, что дисперсия коэффициента самодиффузии в простой жидкости пропорциональна квадрату коэффициента самодиффузии.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и библиографического списка. Она изложена на 110 страницах машинописного текста и включает 40 рисунков. Библиографический список, состоящий из 100 работ, является полным

и показывает, что автор хорошо представляет положение дел в области тематики диссертации. Текст работы понятен и хорошо организован. Полнота и качество изложения материала свидетельствуют о высокой квалификации автора.

К небольшим недостаткам работы можно отнести наличие опечаток.

Указанное замечание не снижает общую положительную оценку диссертации, ее новизну и практическую значимость. Основные результаты работы прошли серьёзную апробацию и были представлены на многих международных и российских конференциях, опубликованы в 7 статьях в серьезных 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, Максим Александрович Орехов, безусловно, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

По основным положениям своей диссертации М.А. Орехов сделал доклад на семинаре кафедры статистической физики СПбГУ. Отзыв рассмотрен и утвержден на заседании кафедры статистической физики СПбГУ «28» февраля 2020 г. (протокол заседания №2).

«2» марта 2020 г.

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

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.

Щёкин Александр Кимович (Санкт-Петербург, 198504, Старый Петергоф, ул. Ульяновская 1, кафедра статистической физики СПбГУ; +7 (812) 428-45-15; 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).