

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.097.01,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Института физики высоких давлений
им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук ПО ДИССЕРТАЦИИ
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 16 сентября 2020 года № 6

О присуждении ОРЕХОВУ МАКСИМУ АЛЕКСАНДРОВИЧУ, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Влияние локальных и коллективных флуктуаций на диффузию в жидкостях» по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния принята к защите 25 декабря 2019 года (протокол № 11) Диссертационным советом Д 002.097.01, созданным на базе ФГБУН Института физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (Минобрнауки России), 108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14 (приказ Минобрнауки № 105/нк от 11.04.2012 г.).

Соискатель, Орехов Максим Александрович, 1993 г. рождения, окончил в 2017 году магистратуру ФГАОУ ВО «Московского физико-технического института (государственного университета)» (МФТИ) по специальности «прикладные математика и физика». С 2017 г. по настоящее время обучается в очной аспирантуре МФТИ на кафедре физики высокотемпературных процессов.

Диссертация выполнена на кафедре физики высокотемпературных процессов МФТИ.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Норман Генри Эдгарович, ФГАОУ ВО НИУ «Высшая школа экономики», Международная лаборатория суперкомпьютерного

атомистического моделирования и многомасштабного анализа, главный научный сотрудник.

Официальные оппоненты:

доктор хим. наук, профессор Маленков Георгий Георгиевич, ФГБУН Институт физической химии и электрохимии имени А.Н. Фрумкина Российской академии наук, Лаборатория поверхностных сил, главный научный сотрудник; доктор физ.-мат. Рыльцев Роман Евгеньевич, ФГБУН Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, Лаборатория аналитической химии, старший научный сотрудник, дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация, ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет» Правительства Российской Федерации, в своем положительном отзыве, подписанном д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН, заведующим кафедрой статистической физики Щёкиным Александром Кимовичем и к.ф.-м.н. доцентом той же кафедры Волковым Николаем Александровичем, и утвержденном проректором по научной работе к.ф.-м.н. Микушевым Сергеем Владимировичем, указала, что представленная работа полностью удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, установленным в «Положении о порядке присуждения ученых степеней»..., а ее автор, Орехов Максим Александрович, безусловно, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Соискатель имеет 7 опубликованных работ в рецензируемых изданиях, в том числе по теме диссертации опубликовано 7 работ, из них в изданиях, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus, опубликовано 6 работ.

Совместные работы соискателя выполнены при его непосредственном участии в постановке задач, проведении численных расчетов, построении и верификации теоретических моделей, анализе и трактовке полученных

результатов, а также в подготовке текста публикаций.

Наиболее значительные работы по теме диссертации:

1. M.A. Orekhov. Fluctuation enhancement of ion diffusivity in liquids // Phys. Chem. Chem. Phys., –2017. –V. 19. –P. 32398.
2. А.В. Ланкин, Г.Э. Норман, М.А. Орехов. Особенности поведения окружения при диффузии ионов в жидкости // Журн. физ. химии., –2019, – Т. 93, –№ 8. –С. 1123.
3. А.В. Ланкин, Г.Э. Норман, М.А. Орехов. Свойства сольватных оболочек и подвижность ионов по данным молекулярной динамики // Журн. физ. химии, –2016, –т. 90. –№ 5. –С. 710.

На автореферат поступили положительные отзывы от д.ф.-м.н., профессора, заведующего лабораторией Теоретического отдела Объединенного института высоких температур Российской академии наук А.Г. Храпака; к.ф.-м.н., главного научного сотрудника Международной лаборатории суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа ВШЭ Г.А. Калиничева; к.ф.-м.н. начальника отдела ФГУП ВНИИА А.В. Янилкина. Отзывы замечаний не содержат.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается строгим соответствием направлений научных исследований, выполняемых оппонентами и реализуемых в ведущей организации, тематике представленной диссертационной работы, наличием публикаций в соответствующей области исследований.

Диссертационный совет отмечает, что соискателем проведено теоретическое исследование локальных и коллективных возбуждений в жидкостях как методом молекулярной динамики, так и с помощью аналитических моделей. В частности:

– Методом молекулярной динамики показано, что на зависимости коэффициента диффузии иона в жидкости от радиуса иона могут наблюдаться множественные максимумы;

- Разработана модель, объясняющая причины возникновения максимумов на зависимости коэффициента диффузии иона от его размера. Сравнение выводов модели с результатами молекулярной динамики и эксперимента показывает хорошее согласие. Проведен тщательный анализ области применимости построенной модели. Эти результаты уточняют существовавшие ранее теоретические модели диффузии ионов в жидкости;

- В рамках предположения о нормальном распределении флуктуаций коэффициента диффузии в жидкости получена и верифицирована формула для дисперсии таких флуктуаций как функции параметров модели. Изучено влияние гидродинамических эффектов на дисперсию коэффициента самодиффузии;

- Предложен подход к расчету коэффициентов самодиффузии в жидкости, позволяющий выделить гидродинамические флуктуации и повысить точность расчетов.

Теоретическая значимость исследования определяется тем, что:

- Построенная теоретическая модель объясняет механизм немонотонного изменения коэффициента диффузии ионов как функции размера ионов в жидкости и определяет условия его обнаружения в эксперименте;

- Впервые обнаруженные эффекты, связанные с процессами диффузии ионов в жидкости, открывают перспективы для систематического изучения транспортных свойств в системах с сильным взаимодействием ионов с молекулами жидкости.

Практическая значимость работы заключается в том, что

- Построенная модель диффузии ионов может быть использована для анализа кинетики реакций и переноса заряда в электролитах;

- Предложенный автором метод повышения эффективности расчетов коэффициента диффузии в жидкости может существенно повысить точность расчетов при использовании первопринципной молекулярной динамики;

- Разработанный в диссертации метод расчета коэффициентов диффузии в жидкости имеет большое практическое значение в связи с поиском новых электролитов для аккумуляторов.

Оценка достоверности проведенных исследований показала, что полученные результаты являются надежными, поскольку построенные теоретические модели подтверждены молекулярно-динамическими расчетами и сравнением с доступными экспериментальными данными, при этом установлено хорошее согласие расчетов, теории и имеющихся в литературе экспериментальных данных. Данные молекулярной динамики проверены автором на самосогласованность путем расчета наблюдаемых величин различными независимыми способами.

Личный вклад соискателя состоит в непосредственном участии на всех этапах работы, представленных в диссертации, а именно: проведении молекулярно-динамических расчетов; построении теоретических моделей диффузии в жидкости; сравнении результатов расчетов с имеющимися в литературе экспериментальными данными, подготовке публикаций.

На заседании диссертационный совет принял решение присудить М.А. Орехову ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 14 докторов наук, участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 14, против – 0, недействительных бюллетеней – 1.

Председатель диссертационного
совета, академик

Стишов Сергей Михайлович

Ученый секретарь
диссертационного совета
к.ф.-м.н.

Валянская Татьяна Валентиновна

18 сентября 2020 г.