

## ОТЗЫВ

*официального оппонента*

*на диссертационную работу Н.П. Крючкова*

*«Элементарные возбуждения и термодинамика простых жидкостей*

*с модельными межчастичными потенциалами взаимодействия»,*

*представленную на соискание ученой степени кандидата*

*физико-математических наук по специальности*

*01.04.07 - физика конденсированного состояния*

Диссертационная работа Н.П. Крючкова посвящена изучению динамики неупорядоченных систем – актуальной проблеме, имеющей огромное значение в физике конденсированной и мягкой материи. Конкретной целью работы является систематическое изучение спектров элементарных возбуждений в классических модельных жидкостях.

Изучение выполнено методом молекулярной динамики на межчастичном пространственно-временном уровне, что позволяет анализировать эффекты ангармонизма в неупорядоченных системах микроскопически. Такой анализ позволяет сделать фундаментальные выводы по коллективным возбуждениям частиц для их сравнения с выводами и получением тестов для мезоскопических теорий (таких как обобщенная гидродинамика и модели квазикристаллического приближения). В этой связи, работа Н.П. Крючкова несомненно является важным новым исследованием для анализа спектров элементарных возбуждений в системах без дальнего порядка, таких как жидкости и неупорядоченные состояния комплексной (пылевой) плазмы.

Работа Н.П. Крючкова состоит из введения, четырех глав, общих выводов и заключения, изложена на 168 страницах, включает 39 рисунков, 9 таблиц и библиографию из 300 наименований.

Во **введении** формулируется актуальность работы, фундаментальная и практическая значимость, методология, методы, оценивается достоверность, новизна работы и личный вклад автора. Отдельно указана апробация работы, которая выполнена на конференциях, симпозиумах, семинарах, учебном пособии и статьях в журналах, рекомендованных ВАК.

**Первая глава** диссертации является обзорной. Приводятся данные о коллективных возбуждениях в конденсированных средах, в частности, в кристаллических системах и жидкостях. Для кристаллов приводится методика расчета фононных спектров в молекулярно динамическом моделировании, а также парных корреляционных функций. Для жидкостей обсуждается

квазилокализованное приближение для оценки спектров возбуждений в жидкостях. Далее приведено описание подходов к изучению спектров элементарных возбуждений при помощи экспериментов с кинетическим уровнем пространственного разрешения, которые можно проводить с комплексной (пылевой) плазмой. На основе этого обзора сформулированы цель и задачи диссертации.

Во **второй главе** исследованы коллективные возбуждения в простых жидкостях. Мотивация такого исследования заключается в том, что спектры возбуждения в жидкостях изучены значительно хуже чем в кристаллах, что обусловлено отсутствием малого параметра, и ярко выраженными эффектами ангармонизма в жидкостях, которые существенным образом видоизменяют структуру спектров. Описаны проводимые расчеты методом молекулярной динамики, изучен вопрос поведения спектров элементарных возбуждений в коротковолновом пределе. Показано, что в жидкости происходит гибридизация мод, приводящая к преобразованию продольной и поперечной моды в низко- и высокочастотные гибридные моды. Изучаются спектры элементарных возбуждений в различных жидкостях. Рассматриваются двумерные и трехмерные жидкости, взаимодействующие посредством потенциала Леннарда-Джонса и отталкивающего обратного степенного потенциала. Результаты анализируются в контексте изучения перехода от состояний с жидко-подобной к газо-подобной динамике.

В **третьей главе** описываются термодинамические свойства двумерных комплексных сред. Приводится описание проводимых МД расчетов для получения результатов систематических расчетов термодинамических свойств двумерных систем частиц, взаимодействующих посредством потенциала Юкавы, в широком диапазоне параметров состояния. Результаты анализа сравниваются с экспериментами на жидкой комплексной (пылевой) плазме. Показано, что экспериментально полученные спектры элементарных возбуждений в жидкости, хорошо согласуются с результатами моделирования методом МД с использованием потенциала Юкавы и теорией антикроссинга мод. Даны результаты расчета фазовых диаграмм для двумерных систем Юкавы с IPL3 притяжением.

**Четвертая глава** посвящена моделированию коллективной динамики и неравновесных явлений в комплексной (пылевой) плазме. Рассмотрены особенности поведения двумерных систем с невзаимными взаимодействиями. Показано, что в системе с диссипацией может возникнуть стационарное состояние, система может проявлять гистерезисное поведение, и для нее может быть построена диссипативная фазовая диаграмма. Про моделировано состояние пылевой плазмы, аналогичное поведению жидкой фазы. Методом молекулярной динамики про моделирован ряд явлений, наблюдаемых в экспериментах с плазмой.



В **Заключении** сформулированы основные выводы работы.

При ознакомлении с диссертационной работой Н. П. Крючкова возникли следующие вопросы и замечания.

1) В диссертации и автореферате используются понятия «диссипативный спиноподальный распад», «диссипативная спиноподаль» и «диссипативная биноподаль». Однако эти понятия не соответствуют общепринятой терминологии (принятой как в российской, так и в зарубежной литературе). Чем обусловлен авторский выбор этих понятий?

2) В диссертации подчеркивается, что разработанные методы пригодны для их применения в широком температурном диапазоне. Однако неясно, как с помощью выполняемых в диссертации расчетов, основанных на методе молекулярной динамики, можно восстанавливать дисперсионные соотношения, а также оценивать эффекты ангармонизма и спектры элементарных возбуждений в переохлажденных жидкостях. Действительно, в последние десятилетия разработаны экспериментальные методы получения глубоких переохлаждений в жидкостях (в основном, - это бесконтейнерные методы обработки жидкого состояния, такие как левитация капель, где достигаются переохлаждения до 400-500 К в жидком состоянии), которые позволяют получать метастабильные фазы в кристаллических и аморфных структурах (часто имеющих свойства, существенно лучшие, чем их стабильные фазы). В этой связи возникает вопрос: каково применение зависимостей и расчетов настоящей работы к анализу переохлажденных жидкостей?

3) При моделировании по методу молекулярной динамики в диссертации не сказано о выборе размеров расчетных доменов в соответствии с изменением температуры и давления в расчетной области. Как выбирался объем (площадь) расчетного домена в соответствии с законом Клапейрона?

4) Как определяются / моделируются «взаимодействия различной мягкости» в жидкостях? Чем определяется «мягкость» в двумерных системах Юкавы?

5) В работе используются понятия «сильного» и «слабого» ангармонизма (стр. 5, 22, 26-28 Диссертации). Можно ли количественно определить эти два понятия?

6) Построены зависимости кинетической энергии во времени для бинарных систем (рис. 4.3 диссертации). Можно ли оценивать динамику этих систем с помощью временного изменения свободной энергии?

7) Утверждается (стр. 7 Диссертации), что с помощью разработанных методов можно анализировать неравновесное плавление. Однако, неясно, что диссертант вкладывает в понятия «равновесного» и «неравновесного» плавления.

Указанные замечания не снижают общую ценность диссертации. Работа Н.П. Крючкова широко опробирована в высокорейтинговых журналах и на конференциях / семинарах, ясно и на современном уровне написана, имеет очевидное теоретическое и прикладное значение, удовлетворяет всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 г., предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор Н.П. Крючков, несомненно, заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Автор отзыва согласен на обработку персональных данных.

Ведущий научный сотрудник лаборатории многомасштабного математического моделирования ФГАОУ ВО «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина» (УрФУ)  
доктор физико-математических наук  
по специальности 01.04.07 -  
«Физика конденсированного состояния»  
профессор

Галенко Петр Константинович

Дата «30» августа 2019 г.

620002, Екатеринбург, ул. Мира, 19, УрФУ, телефон +7(343)389-93-02, адрес электронной почты [lnsm100@googlemail.com](mailto:lnsm100@googlemail.com)

