

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию

Крючкова Никиты Павловича

### «Элементарные возбуждения и термодинамика простых жидкостей с модельными межчастичными потенциалами взаимодействия»

представленной на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук по специальности

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Коллективные возбуждения, протекающие в некристаллических (неупорядоченных) средах вызывают значительный интерес у исследователей на протяжении уже длительного времени. Дело в том, что многие механизмы протекания коллективных возбуждений в неупорядоченных средах и сложных системах различной размерности до сих пор остаются не установленными. Диссертационная работа Крючкова Никиты Павловича «Элементарные возбуждения и термодинамика простых жидкостей с модельными межчастичными потенциалами взаимодействия» посвящена разработке численных и теоретико-функциональных подходов к расчету спектров элементарных возбуждений с учетом эффектов ангармонизма в классических жидкостях с взаимодействиями различной мягкости и в широком диапазоне параметров состояния. Такие исследования являются в настоящее время вполне **актуальными** и **значимыми**. Данная диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения.

Первая глава является обзорной. Здесь рассматриваются коллективные возбуждения в кристаллах, гармоническое приближение для расчета дисперсионных зависимостей, приводятся основные термодинамические соотношения. Также в данной главе детально излагается интерполяционный метод кратчайших графов, позволяющий рассчитывать парные корреляционные функции кристаллов на основе известных фононных спектров и потенциалов взаимодействия.

Вторая глава посвящена анализу коллективной динамики частиц в простых жидкостях; подробно рассматривается вопрос восстановления дисперсионных зависимостей элементарных возбуждений в двумерных и трехмерных системах с учетом эффектов ангармонизма; обсуждается явление антикроссинга мод в простых жидкостях и выводятся основные теоретические соотношения, описывающие данное явление. Достоверность лежащих в основе теории принципов подтверждается хорошим согласием результатов теоретических расчётов для спектров коллективных возбуждений и данных моделирования молекулярной динамики. Диссертантом убедительно показано, что в жидкости происходит гибридизация мод, приводящая к преобразованию продольных и поперечных коллективных возбуждений в низко- и высокочастотные гибридные моды.

В третьей главе представлены результаты комплексного исследования термодинамических свойств двумерных систем частиц, взаимодействующих посредством потенциала Юкавы в широком диапазоне параметров состояния.

Все оценки выполнены на основе изначально полученных данных молекулярно-динамических расчетов. Здесь же представлены результаты расчета фазовых диаграмм для двумерных систем Юкавы с IPL3 притяжением.

Четвертая глава посвящена анализу микроскопических особенностей двумерных систем, описываемых специфическими эффективными взаимодействиями. Показано, что такие системы проявляют гистерезисное поведение, для которых могут быть построены диссипативные фазовые диаграммы. Диссертантом предложен простой балансированный подход, который позволяет рассчитать петли гистерезиса и результирующую диссипативную фазовую диаграмму с существенно более низкими вычислительными затратами, чем при прямом молекулярно-динамическом моделировании. Кроме того, в работе предложена оригинальная модель потенциала взаимодействия частиц в комплексной (пылевой) плазме. Показано, что данная модель позволяет воспроизвести ряд явлений (активационное и гистерезисное поведение, распространение фронтов неравновесного плавления, термоакустическую неустойчивость), наблюдаемых в экспериментах с комплексной (пылевой) плазмой.

В работе выполнены оригинальные исследования коллективных возбуждений в неупорядоченных системах различной размерности и получены интересные результаты: **впервые** предложена теоретическая модель, описывающая явление антикроссинга в жидкостях; **впервые** показано, что совместный анализ мод, или анализ мод с учетом явления антикроссинга, позволяет оценить положение границы *ширины щели* в законе дисперсии поперечной поляризации в широком диапазоне температур; **впервые** рассчитаны фазовые диаграммы двумерных систем Юкавы с дополнительным индуцированным изотропным дипольным притяжением; **впервые** предложена модель потенциала взаимодействия частиц в комплексной (пылевой) плазме с учетом плазменных следов.

По работе есть некоторые замечания и комментарии, связанные с содержанием диссертации:

1. В тексте диссертации и автореферата диссертантом используется, на мой взгляд, не совсем удачная фраза «невзаимные взаимодействия».
2. В тексте диссертации на стр. 12 диссертантом используется некорректное словосочетание «жидкая плазма».
3. В работе слабо обсуждаются микроскопические теоретические подходы к расчету дисперсионных зависимостей в простых жидкостях. Так, в тексте диссертации на стр. 33, автором говорится: «На сегодняшний день, существует два основных подхода к описанию коллективных возбуждений в классических жидкостях, это обобщенная гидродинамика и квази-кристаллическое приближение», в то время как существуют и другие теоретические подходы такие как, например: вязкоупругая модель, теория взаимодействующих мод, микроскопическая теория Мокшина-

Галимзянова, теоретическая модель Ортнера, микроскопическая модель Ткаченко и другие.

4. Уравнения (1.24) на стр. 35 не являются выражениями для дисперсионных соотношений, а являются вторыми частотными моментами спектральных плотностей временных корреляционных функций продольного и поперечного потоков, которые, как известно не способны корректно воспроизводить контуры законов дисперсии.
5. Автор на стр. 38 делается необоснованное утверждение «Наличие области неустойчивых поперечных мод не может быть описано в рамках традиционного подхода QCA, поскольку не учитываются эффекты затухания, также, обусловленные ангармонизмом взаимодействия». Было бы убедительно, если бы автор показал некоторые количественные оценки ангармонизма и эффектов затухания для рассматриваемых систем.
6. На стр. 46 название раздела «Анализ спектров флуктуаций в жидкостях» является некорректным (флуктуаций чего?). Возможно, автор имел в виду «Анализ спектров флуктуаций плотности в жидкостях»?
7. Из приведенного анализа спектров продольного и поперечного потоков в рамках предложенного подхода (на основе совместного и отдельного анализа мод) остается не совсем понятно, в чем заключается микроскопическая природа смещения продольных и поперечных коллективных мод? Каков масштаб пространственной области (области значений волновых чисел), где наблюдается явление смещения этих мод? Как этот масштаб меняется с изменением параметров системы, таких как:  $(T, \rho)$  для классических жидкостей и  $(T, k)$  для системы Юкавы?
8. В рамках предложенного подхода (на основе совместного и отдельного анализа мод) также не дается каких-либо объяснений для так называемой положительной дисперсии скорости звука.
9. В выражении (2.20) на стр. 65 допущена опечатка. Первая частная производная должна быть при постоянной плотности, а не при постоянном давлении.
10. Предложение на стр. 110 «Комплексные (пылевые) плазмы представляют собой мощный инструмент экспериментального исследования различных общих процессов для конденсированных систем на кинетическом уровне» является некорректным. Комплексные (пылевые) плазмы не являются инструментом экспериментального исследования!
11. На стр. 110 в тексте Главы IV диссертант утверждает «В первом приближении взаимодействия микрочастиц в комплексной (пылевой) плазме могут быть описаны при помощи потенциала Юкавы. Вместе с тем, следует помнить, что частицы погружены в неравновесное окружение – поток плазмы. В результате

эффективные силы взаимодействия между ними становятся не взаимными – для них нарушается третий закон Ньютона». Не совсем понятным остается принцип и механизм нарушения третьего закона Ньютона.

12. Фраза на стр. 130 «экспериментальные спектры коллективных флуктуаций» является некорректной.

Сделанные замечания не затрагивают справедливость полученных автором результатов. Оценивая работу в целом, следует отметить, что она представляет собой законченное исследование, выполненное на высоком научном уровне. Результаты работы имеют высокую научную ценность и практическую значимость для физики конденсированного состояния, физики плазмы, материаловедения и физики мягкой материи.

На основании вышесказанного считаю, что диссертационная работа Н.П. Крючкова «Элементарные возбуждения и термодинамика простых жидкостей с модельными межчастичными потенциалами взаимодействия» удовлетворяет всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 г., предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, а ее автор – Никита Павлович Крючков заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук. Автореферат правильно отражает содержание диссертации.

Автор отзыва согласен на обработку персональных данных.

Доцент кафедры вычислительной физики  
и моделирования физических процессов  
Казанского (Приволжского) федерального  
университета, к.ф.-м.н.

Хуснутдинов Рамиль Миннегаязович

11.09.2019

ПОДПИСЬ  
*Хуснутдинов Р.М.* заверяю  
С.А.Куприянова  
Начальник отдела