

УТВЕРЖДАЮ
Зам. директора ФТИ им. А.Ф. Иоффе,
д.ф. м.н., П.Н.Брунков

«24» сентября 2019 г.

ОТЗЫВ
ведущей организации
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Физико-технический институт имени А.Ф. Иоффе
Российской академии наук
на диссертацию Крючкова Никиты Павловича
«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

Актуальность исследования. Концепция коллективных возбуждений играет одну из центральных ролей в современной физике конденсированного состояния. В последние годы наблюдается существенный рост интереса к задачам установления взаимосвязи между спектрами элементарных возбуждений, структурными, динамическими и термодинамическими свойствами жидкостей различной природы. Спектры элементарных возбуждений в жидкостях остаются менее изученными, чем в кристаллах, что во многом обусловлено определяющей ролью

эффектов ангармонизма, отсутствием малого параметра и беспорядком структуры. Одним из проявлений ангармонизма в жидкостях является гибридизация продольных и поперечных мод в коротковолновой области, где ангармонизм наиболее силен. Теоретическое описание этого и других явлений, обусловленных ангармонизмом, требуют разработки методов анализа спектров элементарных возбуждений, полученных как на основе компьютерного моделирования, так и в экспериментах с неупругим нейтронным и рентгеновским рассеянием или с комплексными (пылевыми) плазмами, допускающими кинетический уровень разрешения (отслеживание движения отдельных частиц в реальном времени).

Поэтому разработка новых подходов к анализу спектров элементарных возбуждений в простых жидкостях и экспериментах с кинетическим уровнем разрешения, а также установление их взаимосвязи с термодинамическими и структурными свойствами представляет собой актуальную научную задачу физики конденсированного состояния.

Достоверность результатов диссертации подтверждается корректностью использования методов физики конденсированного состояния и методов вычислительной физики; сравнением с ранее известными результатами. Достоверность результатов компьютерного моделирования подтверждается проведенными проверками на воспроизводимость и устойчивость. Результаты работы опубликованы в ведущих мировых научных журналах, докладывались как на российских, так и на международных конференциях.

Личный вклад состоит в подготовке программных кодов и проведении последующих расчетов методом молекулярной динамики, пост-обработке результатов расчетов и экспериментальных результатов, разработке теоретических моделей, анализе и интерпретации результатов, полученных на основе сопоставления результатов теории, моделирования и экспериментов. Все основные результаты получены автором лично, либо при непосредственном участии.

Научная новизна. Диссертация обладает высокой степенью научной новизны, связанной как с новизной постановок задач, так и с новизной разработанных методов и полученных результатов. В частности, впервые проанализированы различные методы восстановления дисперсионных зависимостей жидкостей вдали от линии плавления, установлены границы их применимости, разработана теория антикроссинга мод в простых жидкостях. Впервые систематически рассчитаны термодинамические характеристики и фазовые диаграммы двумерных систем Юкавы с дополнительным изотропным дипольным притяжением. Впервые систематически изучены системы с невязными эффективными парными взаимодействиями и рассчитаны соответствующие диссипативные фазовые диаграммы. Предложена новая модель взаимодействий в комплексной (пылевой) плазме, учитывающая плазменные следы и применимая в широком диапазоне параметров состояния.

Структура и содержание диссертации. Диссертация состоит из введения, 4 глав и заключения, содержит 168 страниц, 39 рисунков, 9 таблиц. Список литературы включает 300 источников.

Во **введении** кратко представлена актуальность работы, формулируется цель, перечисляются положения, выносимые на защиту, отмечается научная новизна, достоверность, фундаментальная и практическая значимость результатов работы, личный вклад автора, апробация работы и содержание по главам.

Первая глава посвящена обзору и анализу существующих методов расчета коллективных возбуждений в кристаллах и жидкостях. В частности рассматривается гармоническое приближение для расчета дисперсионных зависимостей и термодинамических свойств кристаллов, интерполяционный метод кратчайших графов для расчета парных корреляционных функций в кристаллах на основе фононных спектров и потенциала взаимодействия. Кратко рассматривается квазилокализованное приближение для расчета спектров элементарных возбуждений в жидкостях. Рассматриваются экспериментальные подходы к измерению спектров элементарных возбуждений в конденсированных системах, в том числе в комплексной (пылевой) плазме.

Вторая глава посвящена анализу спектров элементарных возбуждений в простых двумерных и трехмерных жидкостях в широком диапазоне параметров. Проведены исследования точности восстановления дисперсионных зависимостей жидкостей на основе различных подходов и установлены границы областей их применимости. Впервые представлена теория антикроссинга продольных и поперечных мод в простых жидкостях. Систематически исследованы спектры коллективных возбуждений, термодинамические и динамические свойства простых жидкостей с межчастичными взаимодействиями Леннарда-Джонса и обратным степенным взаимодействием.

Третья глава посвящена изучению двумерных система Юкавы. Представлены результаты систематических расчетов термодинамических свойств двумерных систем Юкавы (экранированное кулоновской отталкивание, взаимодействие Дебая-Хюккеля) в широком диапазоне параметров состояния. Приведены результаты сопоставления спектров элементарных возбуждений, полученных в экспериментах с комплексной (пылевой) плазмой и на основе моделирования методом молекулярной динамики. Выполнен расчет фазовых диаграмм двумерных систем Юкавы при различных значениях параметра экранирования с регулируемым изотропным дипольным притяжением.

Четвертая глава посвящена совершенствованию подходов к компьютерному моделированию сильно-коррелированных (кристаллических и жидких структур) в комплексной (пылевой) плазме методами молекулярной динамики. Проведен анализ роли не взаимности эффективных сил действия и противодействия в коллективной динамике многочастичных систем. Предложена новая модель парных взаимодействий микрочастиц в комплексной (пылевой) плазме, позволяющая выполнять моделирования в широком диапазоне значений параметров состояния,

соответствующих экспериментальным исследованиям. Показано, что предложенная модель потенциала взаимодействия воспроизводит с высокой точностью ряд экспериментально-наблюдаемых явлений, в том числе, распространение фронтов неравновесного плавления, активационное тепловое поведение, термоакустическую неустойчивость и коллективную динамику жидкостей.

В заключении сформулированы основные результаты диссертации.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 15 научных работах (15 индексируются в Scopus, 15 – в Web of Science), из которых 15 – научные статьи в журналах, рекомендованных ВАК РФ для публикации основных результатов научных работ соискателей ученых степени кандидата наук. О высоком уровне результатов диссертации косвенно свидетельствует то, что статья соискателя вошла в коллекцию «Editors' Choice 2017» The Journal of Chemical Physics. Всего соискатель имеет 22 научные публикации, индексируемые в Scopus и Web of Science.

Фундаментальная значимость. Предложенный метод анализа мод в жидкостях с учетом эффектов ангармонизма вместе с разработанной теорией антикроссинга мод в жидкостях обладают фундаментальной значимостью, поскольку позволяют анализировать спектры элементарных возбуждений в жидкостях в широком диапазоне параметров состояния, в том числе вдали от линии плавления. Помимо этого, фундаментальной значимостью обладают полученные результаты исследования систем с невзаимными парными взаимодействиями, так как эти результаты открывают новые перспективы для понимания динамики открытых неравновесных многочастичных систем.

Прикладная значимость. Практической ценностью обладают как сами предложенные методы анализа дисперсионных зависимостей в простых жидкостях, так и полученные на их основе дисперсионные зависимости для различных жидкостей в широком диапазоне параметров. Важным результатом является предложенный и программно-реализованный балансированный подход к анализу стационарных состояний систем с невзаимными парными взаимодействиями, так как позволяет существенно сократить объем вычислений, необходимых для расчета соответствующих диссипативных фазовых диаграмм. Рассчитанные значения термодинамических характеристик и фазовые диаграммы различных систем могут быть использованы при анализе экспериментальных исследований. Практической ценностью обладает предложенная модель взаимодействий в комплексной (пылевой) плазме, применимая для расчетов в широком диапазоне значений параметров состояния.

Замечания по диссертационной работе.

В диссертации отсутствует определение термина "простые жидкости", которое активно используется автором в тексте диссертации.

В главе 3 при изучении двумерных систем частиц, взаимодействующих посредством потенциала Дебая-Хюккеля, автор не конкретизирует природу возникновения экранировки в рассмотренных системах и размерность пространства экранирующей среды. Идет ли речь о строго двумерной задаче или рассматривается плоский слой частиц, размещенный в трехмерной экранирующей среде?

В разделе 3.4 автором получены фазовые диаграммы для двумерных систем Дебая-Хюккеля с регулируемым межчастичным изотропным дипольным притяжением, а также упоминается, что эти результаты могут быть сравнены с экспериментальными данными, выполнялось ли такое сравнение?

Автором диссертации явно не демонстрируется нарушение взаимности взаимодействий в предложенной модели межчастичных взаимодействий в комплексной пылевой плазме (ур 4.24).

Заключение

В заключение необходимо отметить, что указанные замечания не изменяют общей положительной оценки уровня диссертации. Диссертация написана ясным научным языком. Полученные в работе результаты являются новыми и важными для физики конденсированного состояния, химической физики, наук о материалах и физики конденсированной мягкой материи.

Диссертационная работа Н.П. Крючкова «Элементарные возбуждения и термодинамика простых жидкостей с модельными межчастичными потенциалами взаимодействия» является завершенной научно-квалификационной работой, выполненной на высоком уровне, в которой решена актуальная научная задача физики конденсированного состояния – разработка новых подходов к анализу спектров элементарных возбуждений в простых жидкостях и экспериментах с кинетическим уровнем разрешения.

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 15 научных работах индексируемых в Scopus / Web of Science, в том числе 15 в журналах рекомендованных ВАК РФ для публикации основных результатов научных работ.

Автореферат диссертации и опубликованные работы полностью отражают ее содержание.

Диссертационная работа Крючкова Н.П. отвечает требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 г. (ред. 02.08 2016 г.), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор, Крючков Никита Павлович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-

математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Настоящий отзыв обсужден и одобрен 24 сентября 2019 года на научном семинаре сектора «Теории оптических и электронных явлений в полупроводниках»

Председатель семинара
доктор физ.-мат. наук, профессор

Аверкиев Н.С.

Подпись Н.С. Аверкиева удостоверяю:

Ученый секретарь ФТИ им. А.Ф. Иоффе,
доктор физ.-мат. наук., профессор

А.П. Шергин

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе,
194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
телефон: +78122972245 электронная почта: post@mail.ioffe.ru
сайт: www.ioffe.ru