

О Т З Ы В

на диссертационную работу
Фомина Юрия Дмитриевича

«Изучение аномального поведения жидкостей методами компьютерного моделирования»,
представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук
по специальности 1.04.07 - физика конденсированного состояния

Актуальность темы

Работа Юрия Дмитриевича Фомина посвящена теоретическому описанию и компьютерному моделированию жидкой фазы вещества. Эта тема сейчас очень актуальна, несмотря на то, что её можно отнести к разряду наиболее старых фундаментальных проблем физики конденсированного состояния. Несмотря на важность проблемы, прогресс в области физики жидкой фазы вещества идет медленно. Наиболее существенные причины этого – отсутствие параметра порядка при теоретическом описании и сложность исследования локальной структуры в отсутствие дальнего порядка и высокой подвижности атомов при экспериментальных исследованиях. Однако, развитие компьютерных расчетных методов и увеличение вычислительной мощности современных компьютеров привело в последнее время к существенному прогрессу в этой области. Количество работ, в которых методом компьютерного моделирования исследуются различные жидкие конденсированные системы, быстро увеличивается. Эти исследования позволяют значительно продвинуться в понимании широкого спектра физических свойств жидкофазных систем и наблюдаемых в них эффектов. Работа, проделанная Юрием Дмитриевичем Фоминым с соавторами, внесла существенный вклад в решение актуальнейших задач этой области физики. В частности, в исследование перехода (кроссовера) жидкости от плотного структурированного состояния к газоподобному бесструктурному состоянию (т.н. линии Френкеля).

Содержание работы. Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций. Оценка новизны и достоверности

Сразу необходимо отметить очень большой объем работы, проделанной Юрием Дмитриевичем, результаты которой изложены в 6-ти оригинальных главах диссертации. В диссертации был рассмотрен широкий спектр актуальных задач физики жидкофазных систем. Работа состоит из введения, 13 глав и списка литературы.

Первые шесть глав являются обзорными. В первой главе изложены базовые положения статистической теории жидкостей. Во второй главе достаточно подробно описаны методы компьютерного моделирования, которые используются в работе: метод Монте-Карло, метод молекулярной динамики, методы вычисления свободной энергии,

парных корреляционных функций, корреляционных функций скорости, методы вычисления транспортных свойств и др. В третьей главе обсуждаются известные результаты расчёта аномальных свойств модельных систем, в которых отталкивательная часть парного потенциала взаимодействия содержит участок с отрицательной кривизной (модель коллапсирующих сфер). В четвёртой главе приводится обзор работ, по моделированию переходов жидкость-жидкость в системах с потенциалом с отрицательной кривизной. Пятая глава посвящена обсуждению особенностей жидкого состояния в двумерных системах. В шестой главе рассматривается поведение жидкости вблизи критической точки.

В седьмой главе приведены результаты исследования модельной системы со сглаженным потенциалом коллапсирующих сфер. Данный потенциал был впервые предложен в работах Ю.Д.Фомина с соавторами и позволил значительно продвинуться в моделировании жидкостей с аномальным поведением. В работе построены фазовые диаграммы систем с мягким потенциалом коллапсирующих сфер, проанализирована сложная структура этих диаграмм.

В восьмой главе анализируется аномальное поведение модельных систем со сглаженным потенциалом мягких сфер с притягивающей частью и без. Рассмотрены аномалии плотности, структуры (избыточной энтропии) и диффузии. Впервые было показано, что проявление аномалий зависит от траектории изменения термодинамических параметров системы. Особенно следует отметить результат работы о том, что в рассмотренных системах соотношение Резенфельда выполняется вдоль изобар и изохор, и не выполняется вдоль изотерм.

В девятой главе исследуется аномальное поведение двумерных модельных систем со сглаженным потенциалом мягких сфер. Построены фазовые диаграммы, впервые было обнаружено, что в рассмотренной системе возможно сразу два сценария плавления: плавление, как фазовый переход первого рода, и плавление, как переход Костерлица-Таулеса-Галперина-Нельсона-Юнга.

В десятой главе анализируется возможность перехода жидкость-стекло в системах, находящихся при высоких температурах и давлениях. В частности изучается возможность такого перехода при изменении параметров модельных систем (модель мягких сфер и модель железа) вдоль линии плавления. Основной вывод этой главы состоит в утверждении, что при изменении термодинамических параметров систем с мягким потенциалом вдоль линии плавления при увеличении давления и температуры стекольный переход в них невозможен. Практически значимым выводом, сделанным по

результатам данной главы, является важное для геофизики утверждение о том, что земное ядро не может находиться в твёрдом стекольном состоянии.

В одиннадцатой главе на примере трёх различных моделей жидкости была проверена предложенная в ряде работ гипотеза о существовании единой линии Видома максимумов различных термодинамических величин в закритической области. Результаты проведённых в работе расчётов свидетельствуют об отсутствии единой линии Видома, что является важным результатом.

Задача исследования вопроса о существовании в жидкой фазе области кроссовера от плотного структурированного состояния к газоподобному бесструктурному состоянию, линии Френкеля, сегодня является одной из актуальнейших проблем. Двенадцатая глава диссертации посвящена исследованию именно этой проблемы. Результаты, полученные в этой главе для модели Леннарда-Джонса, модели мягких сфер и модели расплава железа, подтвердили предположение о существовании достаточно узкой зоны кроссовера, линии Френкеля, расположенной вдоль линии плавления. Очень интересным выводом данной главы является утверждение, что плотность упаковки эффективных сфер, радиус которых вычисляется из структурного фактора, на линии Френкеля совпадает с перколяционным пределом (0.3). Это приводит к очень важному предположению, высказанному в диссертации, что линия Френкеля может быть связана с переходом металл-диэлектрик.

Тринадцатая глава представляет собой заключение, в котором изложены главные выводы диссертационной работы.

В целом, выводы, сделанные в работе, представляются достаточно обоснованными, хотя некоторые из них и являются дискуссионными. К ним я вернусь ниже, при обсуждении замечаний к работе.

Общие замечания по диссертационной работе

К работе есть несколько замечаний:

1. В тексте и выводах диссертации присутствуют фразы: «исследование жидкости», или «исследование железа», при этом имеется в виду анализ компьютерных моделей жидкости, или железа. По моему мнению, использование такой терминологии может ввести читателя диссертации в заблуждение, поскольку речь всё же идёт не о реальных веществах, а об их моделях. Если же автор настаивает на том, что результаты компьютерного моделирования по своей достоверности могут быть приравнены результатам прямого эксперимента, то для этого необходимо провести соответствующие дополнительные исследования: моделирование одной системы несколькими различными методами, их сопоставление, обсуждение области применимости этих методов с

соответствующим их тестированием. В отсутствие таких дополнительных исследований, на мой взгляд, следовало бы в тексте диссертации, и особенно в формулировке результатов указывать методы моделирования, с помощью которых эти результаты были получены.

2. Наиболее дискуссионными представляются мне результаты десятой главы. Хорошо известно, что в области перехода жидкость-стекло жидкость не описывается максвелловской моделью, а время релаксации имеет как минимум два характерных масштаба времени релаксации: быстрая бета-релаксация, соответствующая диффузионному движению атомов и молекул, и медленная альфа-релаксация, соответствующая коллективному движению. При этом переход системы в стекольное состояние соответствует расходимости времени альфа-релаксации. Из анализа скейлинговых соотношений, приведённых в данной главе, трудно сказать к какому типу релаксации относятся сделанные оценки. По моему мнению, они скорее относятся к оценке времени бета-релаксации, поскольку я не увидел, где в приведённых рассуждениях учитываются коллективные процессы. Кроме того, приведённые в работе графики зависимости вязкости от температуры построены в широком диапазоне температур (от 0.1 до 100). К сожалению, не обсуждается вопрос о том, насколько справедливы будут используемые скейлинговые оценки для рассмотренных моделей в таком широком интервале температур. По приведённым выше причинам результаты десятой главы диссертации представляются мне недостаточно обоснованными.

3. К сожалению, в тексте диссертации обнаруживается заметное количество опечаток (например, в формуле 10.1 и т.п.), технических и стилистических недочётов, что несколько скрадывает в целом положительное впечатление о работе.

Однако, отмеченные недостатки не носят принципиального характера и не снижают качества основных результатов диссертации.

Заключение

Диссертация Фомина Юрия Дмитриевича «Изучение аномального поведения жидкостей методами компьютерного моделирования» является законченным научно-исследовательским трудом, выполненным автором на высоком научном уровне. В работе приведены научные результаты, позволяющие квалифицировать их как решение крупной научной проблемы, имеющее важное значение для развития физики конденсированного состояния. Полученные автором результаты достоверны, выводы и заключения обоснованы. Автореферат соответствует основному содержанию диссертации.

Считаю, что диссертационная работа «Изучение аномального поведения жидкостей методами компьютерного моделирования» отвечает критериям Положения о порядке присуждения ученых степеней, а её автор, Фомин Юрий Дмитриевич, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния

в.н.с. ФГБУН ФТИ УрО РАН

д.ф.-м.н.

тел.: +7-906-897-09-30

E-mail: dr_vasin@mail.ru

 Васин М. Г.

Подпись заверяю

Ученый секретарь

ФГБУН ФТИ УрО РАН

к.х.н.

  Гончаров О. Ю.