

аттестационное дело № _____

дата защиты 18.01.2016 протокол № 1

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА ПО ДИССЕРТАЦИИ
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК**

Фомин Юрий Дмитриевич, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук, Лаборатория фазовых переходов в сильно коррелированных и неупорядоченных системах, старший научный сотрудник

Диссертация «Изучение аномального поведения жидкостей методами компьютерного моделирования» в виде рукописи по специальности 01.04.07 (Физика конденсированного состояния) выполнена в ФГБУН Институте физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук в Лаборатории фазовых переходов в сильно коррелированных и неупорядоченных системах.

Научный консультант - доктор физ.-мат. наук Рыжов Валентин Николаевич, ФГБУН Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук, заместитель директора.

Официальные оппоненты:

доктор физ.-мат. наук, профессор, чл.-корр. РАН Муртазаев Акай Курбанович, ФГБУН Институт физики Дагестанской научного центра Российской академии наук, врио директора; доктор физ.-мат. наук, Успенский Юрий Алексеевич, ФГБУН Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, Лаборатория теории сверхпроводимости и статистической физики сложных систем, зав. сектором; доктор физ.-мат. наук, профессор Норман Генри Эдгарович, ФГБУН Институт высоких температур Российской академии наук, Отдел 1.2.2 -компьютерной теплофизики, главный научный сотрудник;

ведущая организация ФГАОУ ВО Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань (заключение составлено Мокшиным Анатолием Васильевичем, доктором физ.-мат. наук, профессором, заведующим кафедры

вычислительной физики и моделирования физических процессов Института физики КФУ)

дали положительные отзывы о диссертации.

На автореферат поступили положительные отзывы: от доктора физ.-мат. наук, профессора кафедры теоретической физики ФГБОУ ВПО «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского» Прудникова Павла Владимировича, ведущего научного сотрудника ФГБУН Физико-технического института Уральского отделения Российской академии наук Васина Михаила Геннадьевича. Отзыв М.Г. Васина содержит несколько замечаний:

Первое замечание носит терминологический характер и связано с употреблением в работе терминов типа “исследование жидкости”, “исследование железа”, хотя при этом имеется в виду анализ компьютерных моделей жидкости или железа.

Второе замечание относится к 10 главе диссертации и связано с обсуждением характера релаксации в области перехода жидкость-стекло: «Из анализа скейлинговых соотношений, приведённых в данной главе, трудно сказать к какому типу релаксации относятся сделанные оценки... Результаты десятой главы диссертации представляются недостаточно обоснованными.»

3. В диссертации обнаруживается заметное количество опечаток, технических и стилистических недочетов....

Однако, как отмечает М.Г. Васин, «отмеченные недостатки не носят принципиального характера и не снижают качества основных результатов диссертации».

Основные результаты диссертации опубликованы в 31 рецензируемом научном журнале и издании, которые индексируются в Web of Science.

Основные работы:

1. Gribova N. V., **Fomin Yu. D.**, Frenkel D., Ryzhov V. N. Waterlike thermodynamic anomalies in a repulsive-step potential -system // Phys. Rev. E. 2009. - V. 79. - P. 051202.
2. **Fomin Yu. D.**, Tsiok E. N. and Ryzhov V. N. Inversion of Diffusion and Density Anomalies in Core-Softened Systems // J. Chem. Phys. - 2011. - V. 135. - P. 234502

3. Бражкин В.В., Ляпин А.Г., Рыжов В.Н., Траченко К., **Фомин Ю.Д.**, Циок Е.Н. Где находится область сверхкритического флюида на фазовой диаграмме? // УФН. - 2012. - Т. 182(11). - С. 1137
4. **Fomin Yu.D.**, Tsiok E.N., Ryzhov V.N. Silicalike sequence of anomalies in core-softened systems // Phys. Rev. E. - 2013. - V. 87. - P. 042122.
5. Brazhkin V. V., **Fomin Yu. D.**, Lyapin A. G., Ryzhov V. N., Tsiok E. N., and Trachenko K. "Liquid-Gas" Transition in the Supercritical Region: Fundamental Changes in the Particle Dynamics // Phys. Rev. Lett. 2013. - V. 111. - P. 145901.
6. **Fomin Yu. D.**, Ryzhov V. N., Tsiok E. N., Brazhkin V. V. and Trachenko K. Dynamic transition in supercritical iron // Scientific Reports. 2014. - V. 4. - P. 7194.
7. Dudalov D. E., **Fomin Yu. D.**, Tsiok E. N., and Ryzhov V. N. How dimensionality changes the anomalous behavior and melting scenario of a core-softened potential system? // Soft Matter. - 2014. - V. 10(27). - P. 4966.

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук «Фазовая диаграмма системы "коллапсирующих" твердых сфер» защитил в 2010 году, в совете ФГБУН Института физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- предложен новый потенциал с отрицательной кривизной в области отталкивания (система сглаженных коллапсирующих сфер) для качественного объяснения аномального поведения воды и ряда других жидкостей;

- произведено детальное изучение фазовых диаграмм и аномального поведения в жидкой фазе в системах с предложенным потенциалом; полученные результаты позволили качественно описать ряд явлений, не имевших объяснения до этого, например, взаимное расположение аномальных областей в жидком кремнеземе;

- показано, что аномальное поведение жидкостей по-разному проявляется вдоль разных траекторий в пространстве термодинамических переменных плотность-температура-давление; важным следствием этого факта является то, что соотношение Розенфельда, устанавливающее связь между термодинамическими и транспортными свойствами жидкостей, выполняется вдоль изохор, но не выполняется вдоль изотерм;

- изучены фазовые диаграммы системы сглаженных коллапсирующих сфер в двумерном пространстве; показано, что в этой системе разные кристаллические

фазы плавятся посредством разных механизмов - квадратная и треугольная фазы высокой плотности плавятся через переход первого рода, тогда как треугольная фаза низкой плотности - посредством двух непрерывных переходов;

- показано, что, несмотря на быстрый рост вязкости при увеличении давления вдоль кривой плавления системы мягких сфер, переход жидкость-стекло не наблюдается, что связано с одновременным быстрым уменьшением времени релаксации в системе;

- показано, что линии окологривических максимумов различных величин (сжимаемость, теплоемкость, коэффициент теплового расширения, корреляционная длина) быстро расходятся при удалении от критической точки, благодаря чему единой линии Видома, широко обсуждаемой в научной литературе, не существует;

- обнаружено новое физическое явление – существование линии динамического кроссовера, разделяющего области жидко- и газоподобного поведения расплавов всех веществ при высоких температурах.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- детально изучены фазовые диаграммы и аномальное поведение системы сглаженных коллапсирующих сфер при различных значениях параметров потенциала; полученные результаты позволяют сделать выводы общего характера о фазовых диаграммах и аномальном поведении широкого класса веществ;

- показано, что соотношение Розенфельда для аномальных жидкостей не является универсальным;

- установлено, что на фазовой диаграмме сглаженных коллапсирующих сфер в двух измерениях могут существовать два сценария плавления, что является важным результатом для изучения фазовых переходов в условиях наноконфайнмента;

- показано, что, несмотря на быстрый рост вязкости жидкости вдоль кривой плавления для системы мягких сфер, кривая перехода жидкости в стекло всегда должна лежать под кривой плавления;

- показано, что широко обсуждаемая в литературе линия Видома является неоднозначно определенной, что не позволяет применять ее для анализа поведения сверхкритических жидкостей;

- введено новое понятие линии Френкеля - линии динамического кроссовера в жидкостях; произведены вычисления линий Френкеля ряда модельных и реальных флюидов.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

- полученные фазовые диаграммы и области аномального поведения системы сглаженных коллапсирующих сфер могут быть использованы для анализа фазовых диаграмм и аномального поведения различных веществ (вода, жидкий кремнезем и др.);

- полученные результаты по зависимости аномального поведения от траектории в пространстве термодинамических переменных являются важными для сравнения теоретических расчетов с результатами экспериментов;

- результаты по двумерному плавлению системы сглаженных коллапсирующих сфер могут быть использованы для предсказания поведения воды и коллоидных систем в условиях наноконфинмента;

- полученные результаты по зависимости вязкости, коэффициента диффузии, модуля сдвига на бесконечной частоте и времени релаксации жидкости вдоль кривой плавления могут быть применены при изучении линий плавления различных металлов; эти исследования также представляют интерес для геофизики и физики планет;

- результаты по изучению околокритических максимумов и динамического кроссовера в жидкостях могут найти практическое применение в быстроразвивающейся в настоящее время области «сверхкритических технологий» с возможными соответствующими приложениями в материаловедении и фармакологии.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что

- результаты получены на основе надежных, общепринятых методов, таких как метод молекулярной динамики, метод Монте-Карло, метод интегральных уравнений и другие;

- полученные результаты демонстрируют совпадение с экспериментальными данными и теоретическими результатами других авторов в тех случаях, когда такое сравнение является возможным.

Личный вклад автора состоит в:

- участия на всех этапах исследования, таких как постановка задач, выбор теоретических методов решения, построение плана исследования, выполнение расчетов, анализ полученных данных и трактовка результатов, написание статей и подготовка докладов на конференциях.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, соответствует критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней, и принято решение присудить Фомину Юрию Дмитриевичу ученую степень доктора физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 19 человек, из них 18 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 19 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за - 19, против - нет, недействительных бюллетеней - нет.

Председатель
диссертационного совета



Стишов Сергей Михайлович

Ученый секретарь
диссертационного совета



Валянская Татьяна Валентиновна

20 января 2016 г.