

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Халаимова Даниила Вячеславовича «Локальная плотность и ближний порядок в классических жидкостях», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности

1.3.8 «Физика конденсированного состояния»

Диссертационная работа посвящена разработке методов исследования молекулярной структуры классических жидкостей на основе формализма интегральных уравнений для частичных функций распределения. Для достижения этой цели построен аналитический метод расчёта более старших членов диаграммного разложения, позволяющий продвинуться за пределы существующих на данный момент времени замыканий упомянутой системы уравнений, который далее применялся как к однородным, так и пространственно-неоднородным системам.

Актуальность выполненной работы

Актуальность работы обусловлена тем, что метод интегральных уравнений в сочетании с численным экспериментом является одним из основных для исследования структурных особенностей (локальная плотность и ближний порядок) классических жидкостей на молекулярном уровне. Ближний порядок и локальную плотность в объёмных жидкостях и их граничных слоях можно вычислить с помощью парных корреляционных функций, являющихся решением системы двух нелинейных интегральных уравнений для одно- и двухчастичной функций распределения. Ядра этих уравнений представлены бесконечными рядами неприводимых диаграмм. Вычисление даже первой неприводимой диаграммы, учитывающей нелокальные взаимодействия, вызывает вычислительные сложности. При рассмотрении объёмных жидкостей эту проблему обходят аппроксимацией бесконечного ряда неприводимых диаграмм простыми аналитическими функциями, что приводит к различным приближённым уравнениям для двухчастичной функции распределения. В результате, все термодинамические величины (исключая химический потенциал), вычисленные с помощью уравнения состояния или сжимаемости, дают разные значения. Соответственно, приходится прибегать к их согласованию. Тем не менее, в литературе такой подход является общепринятым. Однако, аппроксимация бесконечного ряда неприводимых диаграмм аналитическими функциями в уравнении для одночастичной функции распределения и соответственно, вычисления всех термодинамических величин, в литературе до сих пор не рассматривалась. Реализация такого подхода позволяет рассчитать термодинамические характеристики жидкостей и их граничных слоёв без процедуры термодинамического согласования.

Особую сложность представляет описание структурных характеристик стёкол, полученных охлаждением расплава. Один из перспективных теоретических подходов к описанию процессов стеклования является метод реплик, предложенный в работах Джорджо Паризи и других авторов. В методе реплик переход из переохлаждённой жидкости в стекло осуществляется «формальным» внешним полем, фиксирующим частицы в определённых точках пространства. В этом случае интегральные уравнения, справедливые для описания микроструктуры жидкости модифицируются таким образом, чтобы они описывали микроструктуру стеклообразного состояния.

Однако в систему уравнений для частичных функций распределения в качестве заданных параметров входят плотность жидкости и реальное внешнее поле. Поэтому представляется естественным описание перехода из переохлаждённой жидкости в стекло на их основе.

Таким образом, разработка методов решения системы нелинейных интегральных уравнений для одно- и двухчастичной функций распределения применительно к конденсированным средам, является **актуальной проблемой**.

Структура и содержание работы

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы. Общий объем диссертации составляет 92 страницы, включая 10 рисунков, 2 таблицы. Список цитируемой литературы состоит из 45 наименований.

В **Главе 1** рассмотрены основные представления и методы современной статистической физики жидкостей и стекол. Описаны существующие подходы – метод интегральных уравнений и численные эксперименты. Сформулированы достоинства и недостаток существующих подходов в методе интегральных уравнений. Разработан алгоритм вычисления первой неприводимой диаграммы, учитывающей нелокальные взаимодействия.

В **Главе 2** представлена обобщенная аппроксимация Перкуса-Йевики для структуры граничных слоев на основе модельной жидкости твердых сфер. Традиционный подход к решению интегральных уравнений для одночастичной и двухчастичной функций распределения основан на аппроксимации двухчастичной функции распределения её граничным значением вдали от поверхности (синглетное приближение). Это вносит неизвестную погрешность при расчетах структурных характеристик граничных слоев, где локальная плотность и ближний порядок существенно отличаются от объемных. В связи с этим в работе предложена модификация синглетного приближения, учитывающая поправку к прямой корреляционной функции одночастичного уравнения, что позволяет оценить изменение ближнего порядка в граничных слоях жидкостей по сравнению с объемным значением.

В **Главе 3** получено аналитическое решение линейного интегрального уравнения

Фредгольма второго рода для одночастичной корреляционной функции. Вычислены адсорбция и локальная плотность. Показано, что полученные значения этих термодинамических величин близки к значениям численного эксперимента и превосходят по точности результаты, полученные при использовании только замыкания Перкуса - Йевики.

В **Главе 4** предложена аппроксимация бесконечного ряда неприводимых диаграмм, входящих в уравнение для одночастичной функции распределения. Вычислена поправка к прямой корреляционной функции. Задача сведена к решению линейного интегрального уравнения Вольтерра первого рода. Получено численное решение с использованием преобразования Фурье. Произведен расчёт химического потенциала. С помощью строгого термодинамического соотношения из химического потенциала вычислено давление как функция плотности. Расчёт проведён, не прибегая к процедуре согласования по уравнению состояния и сжимаемости, что присуще большинству замыканий в теории интегральных уравнений. Проведен анализ полученных результатов.

В **Заключении** сформулированы основные результаты работы.

Диссертация в целом изложена логично, материалы работы хорошо структурированы и оформлены. Автореферат полно и правильно передаёт содержание и смысл результатов диссертации. Полученные в работе результаты, сделанные на их основе выводы и защищаемые положения прошли апробацию на всероссийских конференциях и были опубликованы в профильных физических журналах, что подтверждает их обоснованность. Публикации в рецензируемых научных изданиях отражают содержание диссертационного исследования. Выводы по диссертации являются достоверными, полными, обоснованными и не противоречат общефизическим представлениям.

Новизна исследования и полученных результатов

Из представленного выше краткого описания содержания диссертационной работы видно, что в ней рассмотрен широкий круг вопросов, связанных с применением метода интегральных уравнений к вычислению структурных и термодинамических параметров конденсированных сред. К числу наиболее значимых новых научных результатов можно отнести следующие:

1. Разработан алгоритм вычисления первой неприводимой диаграммы для прямой корреляционной функции объёмных жидкостей.
2. Впервые предложена аппроксимация бесконечного ряда неприводимых диаграмм для прямой корреляционной функции в уравнении для одночастичной функции распределения (обобщённая аппроксимация Перкуса- Йевики).
3. На основе обобщённой аппроксимации Перкуса - Йевики вычислены прямая корреляционная функция и структурные характеристики граничных слоёв жидкостей.
4. Вычислен химический потенциал в зависимости от плотности молекулярной системы, что

позволило рассчитать термодинамические характеристики жидкостей, не прибегая к их согласованию на основе уравнения состояния или сжимаемости, не прибегая к их согласованию на основе уравнения состояния или сжимаемости.

Научная и практическая значимость результатов

Научная значимость разработанных в диссертации методов выходит за рамки непосредственно физики жидкостей: на их основе возможно сформулировать теорию стеклования расплава с учётом теплоотвода от него.

Результаты данной диссертации могут быть положены в основу вычисления структурных и термодинамических характеристик молекулярных систем со сферически симметричными потенциалами межмолекулярного взаимодействия (жидкости и их граничные слои)

Результаты работы могут быть использованы в научно-исследовательских организациях и университетах, специализирующихся в исследованиях структурных и термодинамических параметров жидкостей и их граничных слоёв: ИГХ СО РАН, Новосибирский государственный университет, НИЯУ МИФИ, СПбГУ, ОИВТ РАН, ИФВД РАН.

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и заключения

Достоверность результатов, представленных в диссертации, обеспечивается адекватным использованием математического аппарата, совпадением полученных аналитических результатов в предельных частных случаях с известными из литературы, а также использованием для моделирования хорошо апробированных численных схем решения интегральных уравнений.

Результаты, представленные в диссертации отражены в 10 печатных работах, включая 4 статьи в профильных физических журналах, в том числе 1 статья в журнале «Известия РАН (серия Физика)» и 3 статьи в журнале «Ядерная физика и инжиниринг» из списка ВАК по специальности 1.3.8.-Физика конденсированного состояния.

По результатам исследований подготовлены и сделаны доклады на 5 Всероссийских научных конференциях.

В соответствии с пунктом 10 диссертация написана автором самостоятельно, обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и положения, выносимые на публичную защиту, отражает личный вклад автора диссертации в исследование структурных и термодинамических характеристик жидкостей.

Замечания по содержанию диссертационной работы

1) Диссертант существенным образом опирается на систему с потенциалом твёрдых сфер. И в тексте (глава 2.1) присутствует словесное описание её фазовой диаграммы, с

указанием параметров упаковки, соответствующим фазовым границам. Но можно было бы и добавить картинку. Кроме этого, помимо уравнения состояния Карнахана - Старлинга следовало бы указать и более свежие уравнения состояния. И бесспорно следовало бы добавить ссылки на оригинальные работы, где получено аналитическое решение для системы твёрдых сфер с замыканием Перкуса - Йевики (уравнение (2.6)).

2) Развитый метод применяется только для системы твёрдых сфер. Это вполне объяснимо, так как именно для этой системы с замыканием Перкуса - Йевики существует аналитическое решение. Но нужно рассмотреть и другие системы с более сложными потенциалами взаимодействия. Хотя это и потребовало бы больше численных расчётов, но сделало бы работу ещё более ценной как с теоретической, так и с практической точек зрения.

3) Нет никаких сравнений с экспериментом. Между тем в диссертации есть ссылка на классическую работу Розенфельда и Ашкрофта, в которой было показано, что в окрестности кривой плавления поведение жидкости становится в ряде аспектов универсальным и подобным, с определённой точностью, именно системе твёрдых сфер. Поэтому надо было бы сравнить структурные факторы - экспериментальные и рассчитанные по предлагаемому методу для твёрдых сфер - в соответствующей области фазовой диаграммы, чтобы понять точность такого подобия.

Неточности и опечатки:

1. Стр. 28. Следующие фразы точные, но неполные.

"Бридж-функционалы в методе интегральных уравнений статистической физики по существу являются аналогом диаграмм Майера в теории неидеальных газов. Отличие в том, что разложение происходит по степеням парной корреляционной функции h "

На самом деле разложение Майера - это тоже разложение по степеням h , но при плотности, стремящейся к нулю

2. Стр. 28. Следующее определение неполное.

"Диаграммы называются неприводимыми так как их не представляется возможным свести к выражению типа свёртка, то есть прямое и обратное Фурье-преобразование не применимо"

Тут нужно аккуратней формулировать, так как есть и другие определения неприводимых диаграмм, не связанные с возможностью возникновения свёртки.

Заключение

Отмеченные недостатки и неточности не имеют характер принципиальных возражений против основных положений работы, не снижают теоретической и практической значимости рассмотренной диссертации. Полученные результаты соответствуют поставленной цели.

Основные результаты получены лично самим автором, либо при его непосредственном участии. Автор принимал участие в выводе аналитических выражений для одночастичной функции распределения и прямой корреляционной функции граничных слоёв жидкостей. Автору принадлежит самостоятельная разработка программного кода, для численного решения уравнения Фредгольма второго рода и Вольтерра первого рода. Анализ и интерпретация результатов осуществлялись совместно с научным руководителем. Автореферат отражает содержание диссертации. Диссертация соответствует научной специальности 1.3.8.- Физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа Халаимова Даниила Вячеславовича на тему «Локальная плотность и ближний порядок в классических жидкостях» является законченной научно-квалификационной работой, обладающей признаками актуальности, научной новизны и значимости для теории и практики.

Представленная диссертационная работа удовлетворяет требованиям пп.9-14 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а её автор Халаимов Даниил Вячеславович заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8.- Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:

д.ф.-м.н.

Апфельбаум Евгений Михайлович

специальность 1.3.14 - теплофизика и теоретическая теплотехника,
старший научный сотрудник лаборатории №7.2 теплофизических и кинетических свойств
вещества, Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН),
125412, г.Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2,
Тел. +74954844433;
E-mail: apfel_e@mail.ru

Подпись Е.М.Апфельбаума заверяю

Учёный секретарь ОИВТ РАН

д.ф.-м.н.



Киверин Алексей Дмитриевич

8.07.2016

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН)
адрес: 125412, г.Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2
тел.: 8 (495) 484-23-00; сайт: <https://www.jiht.ru>; e-mail: webadmin@ihed.ras.ru