«Институт механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук»
- филиал Федерального государственного бюджетного учреждения науки Пермского федерального исследовательского центра Уральского отделения Российской академии наук
(ИМСС УрО РАН)
614013,г.Пермь, ул.Академика Королева, д.1.
Телефон,факс (3422) 37-84-61, (3422) 37-84-87
E-mail: mvp@icmm.ru
ОКПО 15727771, ОГРН 1025900517378,
ИНН/КПП 5902292103/590243001

26.04.2019 № 17400/01-М 52

На №_____ от _____

УТВЕРЖДАЮ

Директор Института механики сплошных сред Уральского отделения Российской академии наук – филиала ФГБУН

дерального

иссл УрО РАН,

Матвеенко

еля 2019 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу Соловьевой Анны Юрьевны «Структурные и магнитные свойства полидисперсных феррожидкостей: теория и компьютерное моделирование», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Диссертация Соловьевой А. Ю. посвящена численному и аналитическому исследованию полидисперсных магнитных жидкостей во внешнем магнитном поле произвольной напряженности. Предметом исследования являются модельные системы взаимодействующих (анизотропный потенциал диполь-дипольных взаимодействий + стерические отталкивания) сферических магнитных диполей, подверженных тепловым флуктуациям и имеющих широкое распределение по размерам. Цель диссертации – получение новой информации о магнитостатических свойствах системы и ее магнитной структуре при больших энергиях межчастичных взаимодействий. В диссертации получены аналитические аппроксимации равновесных магнитных и структурных свойств модельной системы для произвольного распределения частиц по размерам, что делает построенную математическую модель способной описывать микроструктуру и макроскопические свойства реальных полидисперсных феррожидкостей. При численном моделировании системы использовался метод Монте-Карло для каноническом ансамбля (пятьсот частиц в кубической ячейке с периодическими граничными условиями).

Разработанные автором программные комплексы, позволили численно моделировать структурные и магнитные свойства полидисперсных систем и оценить точность и границы применимости аналитических выражений.

Актуальность диссертационной работы связана со следующими обстоятельствами:

1 Известные статистико-механические теории, так, или иначе учитывающие межчастичные магнито-дипольные взаимодействия, позволяют прогнозировать равновесную намагниченность и начальную восприимчивость только для слабо- и умеренно концентрированных феррожидкостей при небольших (порядка kT) энергиях межчастичных взаимодействий.

2 Проблемой построения модели ферроколлоидов с учётом полидисперсности частиц, характерной для реальных систем. Теоретические работы, моделирующие структурные свойства феррожидкостей, ограничиваются либо приближением эффективного поля, либо одной или двумя фракциями, и не могут быть использованы при интерпретации экспериментальных результатов, полученных методом малоуглового нейтронного рассеивания для высоко концентрированных магнитных жидкостей.

3 Отсутствием объяснения аномальных магнитных характеристик высоко концентрированных феррожидкостей, демонстрирующих аномальный рост начальной магнитной восприимчивости с понижением температуры.

Наиболее важные результаты, определяющие **научную новизну** диссертационной работы Соловьевой А.Ю., состоят в следующем.

1 Разработана математическая модель для описания магнитостатических и структурных свойств концентрированных феррожидкостей. Главной особенностью построенной модели является возможность одновременного учета интенсивных диполь-дипольных взаимодействий, произвольного распределения частиц по размерам и влияния внешнего магнитного поля.

2 Впервые получены аналитические выражения, позволяющие прогнозировать начальную магнитную восприимчивость и равновесную намагниченность феррожидкостей в области предельных концентраций феррочастиц.

3 Предложены алгоритмы численного расчета радиальной функции распределения и структурного фактора рассеяния, учитывающие полидисперсность частиц и позволяющие продемонстрировать анизотропию структурных свойств системы во внешнем магнитном поле.

4 Разработаны комплексы программ, позволяющие численно моделировать магнитостатические и структурные свойства полидисперсных коллоидных систем во внешнем магнитном поле методом Монте-Карло.

5 Установлено, что экстремально высокая восприимчивость полидисперсных феррожидкостей при низких температурах связана с широким распределением частиц по размерам. В этих условиях, взаимодействие между крупными частицами вносит наибольший вклад в потенциальную энергию системы.

Таким образом, результаты диссертационной работы А.Ю. Соловьевой позволяют расширить область теоретического описания магнитных свойств до предельно высоких значений концентрации (50-60% по объему) и являются основой для теоретической интерпретации структурных и магнитных свойств полидисперсных феррожидкостей при больших энергиях межчастичных взаимодействий.

Структура и содержание работы. Диссертационная работа А.Ю. Соловьевой «Структурные и магнитные свойства полидисперсных феррожидкостей: теория и компьютерное моделирование» состоит из введения, шести глав основного содержания, заключения, списка цитируемой литературы, включающего 130 наименований, а также восьми приложений, содержащих объемные математические расчеты и копии свидетельств о регистрации программ для ЭВМ. Общий объем диссертации 182 страницымашинописного текста, которые содержат 30 рисунков и 7 таблиц. Во введении обоснована актуальность работы, сформулированы цель, задачи и основные положения, раскрыта научная новизна и практическая значимость работы.

Первая глава носит обзорный характер. Приводятся общие сведения о магнитной жидкости, способы их стабилизации и технологии производства. Излагаются результаты ранее опубликованных исследований, касающиеся теоретического изучения структурных и магнитостатических свойств феррожидкостей, а также компьютерного моделирования сложных коллоидных систем. Обзор литературы соответствует современному состоянию науки о магнитостатических свойствах феррожидкостей и их микроструктуре. Автор демонстрирует отличное знание литературы и глубокое понимание научных проблем. На основании аналитического обзора сделан вывод о необходимости более детального исследования зависимости структурных и магнитных свойств от гранулометрического состава частиц.

Во второй главе диссертации изложены способы математического расчета аналитических выражений для парной функции распределения, радиальной функции распределения и структурного фактора рассеяния полидисперсного ферроколлоида в

магнитном поле произвольной напряженности. На основе данных электронной микроскопии (Лаборатории нейтронной физики имени И.М. Франка ОИЯИ г. Дубна) были определены параметры логнормального распределение частиц по размерам, которое затем использовалось автором диссертации в аналитическом выражении, прогнозирующем структурный фактор рассеяния феррожидкости.

Третья глава посвящена равновесной намагниченности и начальной восприимчивости концентрированных полидисперсных феррожидкостей. Для математического расчета намагниченности была использована модифицированная теория среднего поля второго порядка (МТСП2), но при этом в расчеты закладывалась полидисперсная модель ферроколлоида, а также дополнительно были рассчитаны слагаемые более высоких порядков по дипольной энергии взаимодействия между частицами, поэтому данная теория названа автором МТСП2+. Начальная магнитная восприимчивость была вычислена двумя стандартными методами. Кроме того, автором предложен новый способ аналитического расчета восприимчивости, предполагающий представление свободной энергии Гельмгольца в логарифмической форме (ЛСЭ-теория). Такой подход позволил получить новую формулу для начальной магнитной восприимчивости в виде дроби, которая оказалась более точной по сравнению с классическим представлением восприимчивости в виде ряда по степеням концентрации.

В четвертой главе автором проведена аналитическая обработка экспериментальных данных по равновесной намагниченности и начальной восприимчивости, полученных в Лаборатории динамики дисперсных систем ИМСС УрО РАН (г. Пермь). Показано, что для группы образцов, имеющих одинаковый гранулометрический состав, теория МТСП2+ и ЛСЭ-теория, разработанные автором, демонстрируют минимальный разброс относительной ширины распределения частиц по размерам и среднего диаметра магнитных ядер феррочастиц по сравнению с известными моделями. С помощью новой ЛСЭ-модели впервые удалось описать экстремально высокие значения восприимчивости концентрированных феррожидкостей при низких температурах.

Пятая глава посвящена численным методам расчета структурных и магнитных свойств полидисперсных феррожидкостей. Автор приводит новые алгоритмы численного расчета радиальной функции распределения и структурного фактора рассеяния модельной феррожидкости во внешнем магнитном поле. Намагниченность и начальная магнитная восприимчивость были рассчитаны с помощью стандартных подходов для раствора, содержащего пять фракций. Численные результаты, полученные с помощью авторских алгоритмов, демонстрируют хорошее согласие с аналитическими выражениями, как для структурных, так и для магнитных свойств феррожидкостей.

В **шестой главе** описываются программные комплексы, разработанные автором для исследования структурных и магнитных характеристик в дипольных системах. Описаны используемые технологии, состав программных комплексов, их функциональные возможности и примеры работы. Кроме того, автор приводит дополнительный алгоритм построения начального состояния в системах с высокой плотностью, разработанный для полидисперсной модели феррожидкости.

По диссертации А.Ю. Соловьевой необходимо сделать два замечания:

1. Пункт 1 в разделе «Научная новизна результатов» и пункт 2 в разделе «Основные результаты работы» в автореферате следует уточнить. Речь может идти только о больших значениях параметра магнитодипольных взаимодействий ($\lambda \geq 1.5$), так как при меньших значениях этого параметра прекрасно работает модифицированная модель эффективного поля, учитывающая как межчастичные взаимодействия, так и полидисперсность частиц.
2. Границы применимости новой ЛСЭ-модели (по концентрации частиц и параметру λ) также нуждаются в уточнении.

Указанные замечания носят рекомендательный характер и не изменяют общее положительное впечатление о диссертации. **Анализ диссертационной работы** показывает, что содержание и структура диссертации находятся в логическом единстве и соответствуют поставленной цели исследования. Работа выполнена на высоком методическом уровне. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 34 работах, **включая шесть статей в ведущих рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК и входящих в базы данных Web of Science и Scopus, и одну статью, входящую в базу данных Scopus.** Научные результаты А.Ю. Соловьевой хорошо известны специалистам, работающим с магнитными жидкостями, по докладам автора на международных и российских конференциях. Диссертация хорошо оформлена и легко читается. **Текст автореферата полностью соответствует содержанию диссертации.** Он в достаточном для понимания объеме отражает наиболее важные моменты работы. Оформление автореферата отвечает требованиям положения ВАК РФ.

Достоверность полученных результатов обеспечивается использованием апробированных статистико-механических методов исследования, математической строгостью получения аналитических выражений, хорошим согласием теоретических результатов с результатами численных расчетов и данными физических экспериментов. Достоверность результатов численного моделирования подтверждается успешным тестированием разработанных программных комплексов на модельных задачах,

исследуемых в более ранних работах других авторов. Два разработанных программных комплекса прошли процедуру государственной регистрации в Роспатенте.

Научная и практическая значимость работы состоит в том, что: 1) В отличие от известных математических моделей, ЛСЭ модель, разработанная в диссертации, прекрасно «работает» в области больших энергий магнитодипольных взаимодействий (до 3 kT). 2) Полученные аналитические выражения для структурных и магнитостатических характеристик феррожидкостей позволяют прогнозировать их свойства в зависимости от дисперсного состава частиц, их концентрации и напряженности внешнего поля. 3) Разработанные автором программные комплексы могут быть использованы для компьютерного моделирования коллоидных систем с другими типами межчастичных взаимодействий (например, Ван-дер-Ваальсовыми); 4) Аппроксимации, описывающие структурных свойств полидисперсных феррожидкостей, могут применяться для анализа экспериментальных данных, полученных методом малоуглового нейтронного рассеивания.

Результаты и выводы, приведенные в диссертации, можно рекомендовать к использованию в Пермском федеральном исследовательском центре УрО РАН (Пермь), Институте механики МГУ им. Ломоносова (Москва), Институте химии растворов им. Г.А. Крестова РАН (Иваново), Северо-Кавказском федеральном университете (Ставрополь), Ивановском государственном энергетическом университете им. В.И. Ленина (Иваново), Юго-Западном государственном университете (Курск).

Заключение

Диссертационная работа Соловьевой Анны Юрьевны «Структурные и магнитные свойства полидисперсных феррожидкостей: теория и компьютерное моделирование» оставляет очень хорошее впечатление. Сделанные выше замечания не носят принципиального характера. Основные результаты диссертации опубликованы в рецензируемых международных журналах, рекомендованных ВАК и входящих в базы данных Web of Science и Scopus. Диссертация А.Ю. Соловьевой является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения и алгоритмы, совокупность которых можно квалифицировать как серьезный научный результат в области математического и компьютерного моделирования полидисперсных сред с анизотропными межчастичными взаимодействиями.

Таким образом, диссертация «Структурные и магнитные свойства полидисперсных феррожидкостей: теория и компьютерное моделирование» соответствует требованиям п.9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», а ее автор, **Соловьева Анна Юрьевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.**

Диссертация А.Ю. Соловьевой обсуждалась на объединенном научном семинаре лабораторий «Вычислительной гидродинамики», «Динамики дисперсных систем», «Физики и механики мягкого вещества» и получила положительную оценку (протокол № 6/19 от 24.04.2019).

Председатель семинара,
заведующий лабораторией «Вычислительной
гидродинамики» ИМСС УрО РАН,
доктор физ.-мат. наук, профессор Любимова Татьяна Петровна