Отзыв официального оппонента, д. ф.-м. н., профессора Кракова М.С. на диссертацию

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

Эпиграфом к диссертационной работе А.Ю. Соловьевой вполне может служить фраза Исаака Ньютона из письма Роберту Гуку «Если я видел дальше других, то это потому, что я стоял на плечах гигантов». Действительно, работа посвящена решению проблемы, которая давно находится в фокусе многих исследователей: определение взаимосвязи внутренней структуры магнитной жидкости и ее магнитных характеристик. Сложность проблемы состоит в том, что магнитная жидкость (феррожидкость) представляет собой коллоидный раствор магнитных частиц, покрытых слоем поверхностно-активного вещества, которые взаимодействуют между собой весьма сложным образом, причем потенциал взаимодействия не является центрально-симметричным. При этом, если экспериментальные данные по магнитным характеристикам относительно легко доступны, то определение внутренней структуры жидкости весьма затруднено. В связи с этим проблема превращается в типичную некорректную обратную задачу, когда целью является определение структуры по конечным экспериментальным данным, что является одной из сложнейших задач моделирования. Для решения этой задачи автору работы пришлось разработать модель магнитных жидкостей, являющуюся развитием существовавших ранее моделей и наилучшим на сегодняшний день образом описывающую взаимосвязь структурных свойств жидкости, ее дисперсного состава и магнитных характеристик.

Кроме того, для определения степени достоверности сформулированной модели в работе были разработаны методы, алгоритмы и комплексы программ для исследования полидисперсных модельных феррожидкостей во внешнем магнитном поле посредством компьютерных экспериментов на основе вероятностного метода Монте-Карло. Проведено сравнение полученных теоретических результатов для радиальной функции распределения, структурного фактора рассеяния, намагниченности, начальной магнитной восприимчивости с результатами компьютерных экспериментов, реализованных автором диссертационного исследования. Это сделало работу цельным, законченным исследованием, которое во многом поставило завершающую точку многолетним усилиям различных групп исследователей по построению подобной модели.

Актуальность проведенных А.Ю. Соловьевой исследований связана с двумя причинами. Первая состоит в том, что магнитные жидкости широко применяются в многочисленных технических устройствах, причем принципиальными для работы этих устройств являются именно магнитные характеристики, которые в значительной степени определяются составом магнитных жидкостей и, как следствие, их структурой. Таким образом, результаты, полученные в диссертационной работе, критически важны. Вторая причина в отсутствии надежных математических моделей, численных методов и комплексов программ, описывающих и позволяющих прогнозировать взаимосвязь структурных и магнитных свойств жидкостей и, соответственно, управлять ими. Особый интерес как для практического использования, так и с теоретической точки зрения представляют достаточно концентрированные феррожидкости. Даже в умеренно концентрированных коллоидных системах, где доля объемной фазы составляет всего несколько процентов, межчастичные магнитные взаимодействия очень существенно влияют на все их физические характеристики. Кроме того, феррожидкости состоят из магнитных наночастиц разного размера, что значительно усложняет их теоретическое описание. Изучению сложных многофракционных коллоидных систем с интенсивными межчастичными взаимодействиями и посвящена диссертационная работа А.Ю. Соловьевой. Востребованность этих результатов не вызывает сомнения, что и определяет актуальность и научную значимость этого исследования.

Теоретическое значение работы заключается в формулировке модели, адекватно описывающей взаимосвязь внутренней структуры магнитной жидкости и ее магнитных характеристик. В рамках этой модели были получены аналитические выражения для вычисления структурных и магнитных характеристик в коллоидных системах с произвольной функцией распределения частиц по размерам; установлены физические причины значительного повышения начальной магнитной восприимчивости предельно-концентрированных феррожидкостей с понижением температуры, наблюдаемого в натурном эксперименте. Практическое значение диссертационной работы состоит в том, что полученные математические аппроксимации и численные расчеты структурных и магнитных характеристик полидисперсных коллоидных систем важны для создания смарт-материалов с контролируемыми свойствами. Разработанные программные комплексы, использующие вероятностный подход, основанный на методе Монте-Карло, могут быть применены для компьютерного моделирования различных многофракционных систем, исследования микроструктуры различных образцов магнитных жидкостей.

Высокая степень обоснованности и достоверности результатов диссертационной работы обусловлена выбором апробированных методов статистической термодинамики, тщательной проработкой методики компьютерного эксперимента, качественным и

количественным согласованием полученных результатов математического моделирования и данных, полученных при проведении компьютерных и физических экспериментов. Особо следует отметить, что соответствие результатов, полученных в рамках диссертационной работы, физическим экспериментам, известным в литературе, является на сегодняшний день наилучшим из возможных.

Диссертационная работа А.Ю. Соловьевой состоит из введения, шести глав основного содержания, заключения и списка цитируемой литературы.

В первой главе диссертации автор проводит обзор литературы, демонстрирующий современное состояние науки о концентрированных феррожидкостях. Приведены наиболее важные работы, касающиеся теоретического изучения магнитных и структурных свойств, а также описаны основные методики компьютерного моделирования коллоидных систем с дальнодействующими межчастичными взаимодействиями. Эти работы стали в значительной степени основой исследований автора, в результате удалось сформулировать в работе модель, способную наиболее точно описывать магнитные жидкости. Глубокое владение состоянием предыдущих исследований, продемонстрированное А.Ю. Соловьевой в первой главе работы, обеспечило высокую содержательность проведенных в работе исследований.

Ключевой, безусловно, является вторая глава работы, которая содержит построение математической модели полидисперсной феррожидкости во внешнем магнитном поле, а также вывод аналитических аппроксимаций, описывающих структурные свойства модельной системы с учетом магнитных корреляций между частицами. Проведенное сравнение полученной математической записи структурного фактора рассеяния с данными физического эксперимента продемонстрировало возможность применимости построенной теории для описания реальных полидисперсных образцов феррожидкости.

Данные второй главы автор использует в последующих главах для получения конкретных результатов. Так, в третьей главе получены аналитические выражения магнитных свойств полидисперсной феррожидкости во внешнем магнитном поле произвольной напряженности. За основу берется модифицированная теория среднего поля второго порядка (в терминах диссертации – МТСП2), с помощью которой удается связать полученное автором аналитическое выражение парной функции распределения и намагниченность полидисперсной системы. Новая теория, названная МТСП2+, при этом содержит дополнительные слагаемые высокого порядка по энергии диполь-дипольного взаимодействия, которые также очень чувствительны к функции распределения частиц по размерам и позволяют точнее описывать полидисперсные системы, по сравнению с классической формой МТСП2.

Четвертая глава посвящена анализу экспериментальных измерений намагниченности и начальной магнитной восприимчивости с помощью разработанной автором теории МТСП2+, а также предложенной автором универсальной математической формой восприимчивости – ЛСЭ-теории. Сравнение теоретических выражений и данных физического эксперимента демонстрирует преимущество новых МТСП2+ и ЛСЭ-теории по сравнению с классическими моделями феррожидкости, предложенными ранее.

В пятой главе автор описывает алгоритмы, разработанные для численного расчета структурных и магнитных свойств феррожидкости, способы оценки погрешности статистических данных, дискретные модельные системы, используемые для проведения компьютерных экспериментов. Сравнение численных результатов, полученных с помощью описанных методов расчета исследуемых характеристик, с теоретическими выражениями радиальной функции распределения, структурного фактора, намагниченности и восприимчивости демонстрируют качественное и количественное согласие обоих подходов, используемых автором для описания полидисперсных феррожидкостей.

Шестая глава содержит описание структуры разработанных комплексов программ и порядок запуска компьютерных экспериментов. Автор приводит примеры файлов с входными данными и результирующей статистикой, полученной по завершению компьютерного эксперимента. Также приводится алгоритм построения начальной расстановки частиц в плотных полидисперсных системах без самопересечений.

В целом работа А.Ю. Соловьевой оставляет исключительно положительное впечатление, к методам и полученным в работе результатам в рамках заложенных в работе приближений и замечаний нет. Однако неизбежными являются мелкие неточности в тексте работы. В частности, по тексту работы можно сделать следующие замечания:

1. На стр. 15 после перечисления сил взаимодействия между частицами автор пессимистично заявляет: «Ясно, что учет всех взаимодействий сразу является невозможной задачей», уделяя в работе основное внимание магнитным силам взаимодействия. В виду решения в работе наиболее сложной задачи правильного учета магнитного взаимодействия можно было бы заменить слово «невозможной» на «сложной» или указать, что учет иных сил является второстепенной задачей.

2. На стр. 41 и далее используется выражение для диаметра частицы $\sigma_i = x_i + \delta$, в котором величина δ называется «толщиной немагнитной оболочки», хотя по смыслу это двойная толщина оболочки, что автор в работе и подтверждает, используя в расчетах величину δ/2. Т.е можно отметить небольшую терминологическую неточность.

3. Начиная со стр. 35 и далее фигурирует понятие «толщина немагнитного слоя частиц». В работе в основном фигурирует значение этой толщины 2 нм, что неявно отсылает

к длине молекулы олеиновой кислоты. Но ряд авторов указывает, что наружный слой твердой магнитной частицы вследствие хемосорбции олеиновой кислоты также становится немагнитным. Этот слой оценивается как шаг кристаллической решетки магнетита, т.е. примерно 0,08 нм. Тогда общая толщина немагнитного слоя в реальных магнитных жидкостях может быть оценена как примерно 2,1 – 2,2 нм. Интересно было бы оценить влияние изменения толщины немагнитного слоя на полученные в работе результаты.

4. Требует дополнительных пояснений изложенная на стр.44 методика разложения функции g(1,2) в ряд Маклорена по малому параметру ε, когда после разложения в ряд с точностью до членов второго порядка малости по ε величина этого параметра полагается равной 1.

5. На рис. 4.2 и 4.3 на стр. 86 и 87 показана зависимость величины $4\pi\chi$ от температуры, причем эта величина лежит в диапазоне 15 – 100, в то время как на стр. 88 сказано «можно отметить экстремально высокие значения начальной магнитной восприимчивости $\chi \sim 100 - 120$ при низких температурах $T \sim 230 - 240$ К». Можно предположить, что в тексте речь идет не о восприимчивости χ, о величине $4\pi\chi$. По-видимому, здесь традиционная путаница в терминах, связанная с использованием систем СГС и СИ.

6. На стр. 95 и далее при описании компьютерного эксперимента варьируются термины «длина компьютерного эксперимента» и «длительность компьютерного эксперимента». Скорее всего, автор имела в виду все-таки длительность эксперимента, хотя количество МК-шагов не вполне есть протяженность эксперимента во времени.

7. В компьютерных экспериментах используется фиксированное число частиц, например, в МК-экспериментах 500. Однако в тексте нет обоснования использования именно этого числа частиц.

6. В тексте работы присутствуют неизбежные опечатки и стилистические ошибки. Например, на стр. 45 7-я строка снизу утеряно согласование слов: «магнитный моментов», следует читать «магнитных моментов». Начало последнего абзаца «С учетом формул (1.3.11)…» следует читать «С учетом формул (1.3.10)…». В начале стр. 42 использовано сочетание «единичные вектора», хотя следовало бы писать «единичные векторы». Второе предложение раздела 2.2 на стр.43 имеет вид «Все эти свойства с помощью…», явно следует писать «Все эти свойства определяются с помощью…»

Сделанные замечания и сформулированные выше вопросы носят частный характер и не влияют на положительную оценку работы. Диссертация написана вполне ясным языком, снабжена подробной графической информацией. Рассматриваемая диссертация представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, выполненную соискателем самостоятельно на высоком научном уровне. Ее основное содержание отражено

в периодической печати (семь статей принадлежит изданиям, индексируемым в системах Scopus и Web of Science) и в двух зарегистрированных программных комплексах, доложено на симпозиумах и конференциях всероссийского и международного уровня. Автореферат диссертации полно и правильно отражает ее содержание. Тема и содержание работы соответствуют паспорту специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Представленная диссертация удовлетворяет всем требованиям п.п. 9-14 действующего «Положения о присуждении учёных степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям, 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.

Официальный оппонент:
доктор физико-математических наук,
профессор кафедры ЮНЕСКО «Энергосбережение и
возобновляемые источники энергии»,
Белорусский национальный технический университет,
Тел: (+375)17-292-10-11
E-mail: mskrakov@gmail.com
Адрес: Республика Беларусь, 220013,
г. Минск, пр-т Независимости, 65

Краков Михаил Самуилович

«24» апреля 2019 г.

Свидетельствую подлинность подписи Кракова
Начальник отдела кадров