

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу **Воронцова Александра Геннадьевича «Структурообразование в простых металлических системах в жидкой фазе и при переходе пар-жидкость»**, представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния в диссертационном совете Д 212.298.04 при ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный университет» (НИУ)

Диссертационная работа А.Г.Воронцова посвящена теоретическому исследованию свойств простых металлических систем вблизи перехода «пар-жидкость», включая сверхкритические состояния. Интерес к изучению структуры жидких металлов в широком интервале температур и давлений связан с расширяющейся областью их применения в современных технологических процессах в которых реализуются экстремальные состояния веществ (использование в качестве теплоносителя в атомных реакторах, управление процессами сварки и радиационной обработки поверхности и т.д.). Также известен интерес современной техники и технологии к использованию новых неупорядоченных и наноразмерных материалов. Широкое использование при производстве красок, смазок и покрытий получили металлических наночастицы, большая часть которых производится методом конденсации из паровой фазы. Это обуславливает интерес к изучению зависимости их свойств, в том числе и структуры, от технологии их производства. Сказанное свидетельствует об **актуальности темы исследований**, поскольку указанные состояния вещества на сегодняшний день слабо изучены и теоретически и экспериментально.

Работа состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы из 270 источников, изложена на 334 страницах машинописного текста.

Во **введении** приведено обоснование актуальности темы диссертационной работы, сформулированы цели и задачи работы, основные положения, выносимые на защиту, обсуждена научная новизна и практическая значимость диссертационной работы. Дана краткая характеристика содержания диссертации.

В **первой главе** приводится литературный обзор и анализ имеющихся экспериментальных данных и теоретических положений, относящиеся к вопросу структурных переходов в простых жидкостях при движении в однофазной области состояний вокруг критической точки. Рассмотрены особенности изменения свойств

металлических и неметаллических жидкостей при движении вдоль указанного термодинамического пути. Отмечено отсутствие универсальной теории жидкого состояния в рамках традиционных статистических методов из-за практической невозможности описания многочастичных корреляций, существующих в системе.

Так же в этой главе рассмотрены экспериментальные и теоретические результаты, по изучению процесса формирования жидкости из пара при конденсации. Рассмотрена совокупность макроскопических и микроскопических процессов, протекающих в системе. Указано, что данные процессы оказывают сильное влияние друг на друга, затрудняющее разработку моделей для описания всей совокупности наблюдаемых явлений. В заключении главы сформулирована цель работы и поставленные задачи.

Первая половина **второй главы** представляет собой обзор методик компьютерного моделирования и анализа атомной структуры веществ в неупорядоченном состоянии. Дано описание параметров моделей и условий моделирования, обеспечивающих надёжность статистических оценок свойств веществ и их независимость от выбора граничных условий. Приведено сравнение эффективности современных методик для оценки структурных параметров неупорядоченных веществ. Здесь же предложена оригинальная методика анализа геометрической атомной структуры, позволяющая количественно характеризовать изменение структуры жидкости произвольной плотности.

Вторая половина данной главы содержит описание принципов атомистического моделирования процесса формирования атомных кластеров при конденсации пара металла в среде инертного газа при получении ультрадисперсных порошков. Приведены результаты моделирования начальной стадии конденсации, полученные автором при использовании в моделях различных термодинамических условий. Показано качественное согласие результатов моделирования с предсказаниями теории нуклеации, но отмечено их значительное количественное различие. Сделаны выводы, что изучение конденсации требует более детального изучения параметров, влияющих на рост малых кластеров.

В третьей главе диссертации проведено исследование структуры простых монокристаллических систем с разным характером межатомного взаимодействия (модель твердых сфер, модель с потенциалом Леннарда-Джонса, модели металлов) и находящихся в разных термодинамических состояниях, охватывающих всю область существования жидкости, включая сверхкритические состояния. При обобщении исследований, выполненных в третьей главе, сделано заключение, что в простых жидкостях переход от плотной жидкости к рыхлой связан с упаковкой атомных остовов и проявляется при плотностях упаковки

твёрдых сфер около 0,3. Для моделей реальных веществ этот переход расположен в жидкостной и флюидной (сверхкритической) части фазовой диаграммы. Изменение структуры жидкости сопровождается изменением типа коллективного движения атомов и может наблюдаться в прецизионных экспериментах по изучению распространения звука и сжимаемости вещества.

В четвертой главе проведено изучение электронной структуры и свойств металлических расплавов при изменении состояний вдоль кривой равновесия жидкость - пар вплоть до критической точки. Обсуждены механизмы перехода металл - неметалл и корреляции в изменении электронных свойств и атомной структуры. На основе результатов, полученных при помощи оригинальной методики моделирования электронной структуры и свойств расплавов металлов при пониженных плотностях, и анализа структуры, выполненного в третьей главе, сделано заключение, что наблюдаемые аномалии температурных зависимостей магнитной восприимчивости, сдвига Найта, электропроводности расплавов и положение перехода металл-неметалл в щелочных металлах и ртути объясняются совместным изменением пространственных атомных конфигураций и перестройкой электронных состояний.

Пятая глава посвящена рассмотрению энергетического состояния и структурных особенностей атомных комплексов (кластеров малых размеров), образующихся при конденсации пара металла на примере формирования кластеров меди в среде аргона. Показано, что внешние степени свободы кластеров находятся в тепловом равновесии со средой (парогазовой смесью), а внутренние степени свободы значительно перегреты. Найдено, что процесс остывания кластеров занимает время, большее, чем время нуклеации, что может объяснять количественное расхождение результатов моделирования и предсказаний существующих теорий в системах с большими степенями пересыщения.

Показано, что процесс формирования структуры конденсированной фазы состоит из нескольких этапов: формирования малого атомного комплекса с уплотнённой центральной частью, разрастании уплотнённого слоя с формированием в центре кластера области со структурой объемной фазы. Дальнейшее увеличение размера кластера приводит к росту его внутренней части, при сохранении размера поверхностного слоя.

Среди **основных результатов**, отражающих научную новизну и практическую значимость диссертационной работы, можно особо выделить следующие:

1. Предложен способ анализа структуры систем без дальнего порядка. Данный метод позволяет количественно охарактеризовать структуру таких систем. Установлены корреляции предложенной количественной характеристики структуры и свойств системы жидкость-флюид-газ.

2. На основе молекулярно-динамических исследований показано, что при конденсации из паровой фазы вещество образующихся кластеров оказывается перегретым по сравнению с окружающим паром (газом), что ограничивает скорость конденсации пара. Такой перегрев связан с тем, что осаждающиеся на кластеры молекулы передают им свою избыточную энергию (внутренняя энергия пара больше чем у жидкой фазы при той же температуре), а теплоотвод оказывается недостаточно эффективным. Подтверждение данного факта в проведенном автором диссертации молекулярно-динамическом исследовании важно для разработки моделей конденсации.

Достоверность результатов работы обеспечивается тщательным анализом точности расчетов, сравнением с экспериментальными данными.

Результаты работы **в достаточной степени опубликованы** в печати и представлены на научных конференциях. Среди опубликованных работ имеется 21 статья в рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ для представления результатов диссертационных исследований, и одна монография. **Автореферат полностью отражает содержание диссертации.**

При ознакомлении с содержанием диссертационной работы возникли следующие **вопросы и замечания:**

1. Стиль текста диссертации больше соответствует монографии или учебнику. Содержится большое количество обзорного материала, который сосредоточен не только в первых двух главах, но и в водных разделах последующих глав. Складывается впечатление, что обзорная часть занимает почти половину текста диссертации. При этом нет четких переходов в структуре диссертации между обзорными и оригинальными частями работы, что затрудняет оценку собственных результатов автора.
2. В нескольких местах в диссертации (например, стр. 99, 173) говорится, что потенциал межчастичного взаимодействия должен зависеть от термодинамического состояния среды, в первую очередь, от ее плотности. Как утверждается, это связано с перестройкой электронной структуры при увеличении плотности вещества. Данное утверждение не вполне понятно, поскольку потенциалы взаимодействия как раз и являются функциями

3. Непонятно, почему использование термина «атомный комплекс» для малых «кластеров» связано с «газо-жидкоподобным состоянием» последних (стр. 265, первое предложение второго абзаца)?

Диссертационная работа «Структурообразование в простых металлических системах в жидкой фазе и при переходе пар-жидкость» отвечает квалификационным требованиям, установленным в п. 9 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемым к работам, представленным на соискание ученой степени доктора наук, а ее автор, Воронцов Александр Геннадьевич, заслуживает присуждения степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

8(351)7997161, mayer@csu.ru

Подпись *М. И. Гусев*
удостоверяю *А. А. Гусев*
08.12.2014г