

«УТВЕРЖДАЮ»



Зам. директора

Института химической физики

им. Н. Н. Семёнова РАН, д.ф.-м.н.

Ю. Ф. Крупянский

наш 2014 г.

## О Т З Ы В

ведущей организации на диссертацию

Блинова Вениамина Николаевича

### «Топология фазовых диаграмм ферромагнитных коллоидов с дальнодействующими взаимодействиями»,

представленную на соискание учёной степени кандидата физико-

математических наук по специальности

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Блинова В. Н. посвящена численному исследованию ферромагнитных колloidных систем со значительными магнитными взаимодействиями. **Актуальность** этой проблемы в настоящий момент не представляет сомнения. Во-первых, ферромагнитные жидкости появились относительно недавно, и их теоретическое изучение представляет значительный интерес. Они сочетают в себе свойства жидкости и ферромагнетиков, что приводит к интересному поведению при приложении внешнего магнитного поля и увеличении объёмной доли колloidных частиц. Ввиду своих необычных свойств ферромагнитные жидкости нашли множество технологических применений, и их число со временем будет возрастать.

Во-вторых, теоретическое изучение таких систем с помощью различных аналитических подходов представляется крайне затруднительным, поэтому численные методы являются основным инструментом в изучении таких систем.

Актуальный класс задач в этой области связан с изучением микроскопической структуры магнитных коллоидов в зависимости от параметров системы (дипольной силы частиц, концентрации, температуры, внешнего приложенного поля и др.). Диссертация Блинова В. Н. посвящена одной из таких задач, а именно, изучению ближнего порядка ориентации дипольных моментов частиц ферромагнитной жидкости при различных значениях концентрации.

**Методология работы** состоит в компьютерном исследовании теоретической модели ферромагнитной жидкости, основанном на рассмотрении ближнего ориентационного порядка частиц.. Автором выбрана т.н. модель Штокмайера, представляющая собой ансамбль сферических частиц с точечным дипольным моментом в центре. Взаимодействие частиц состоит из дальнодействующей диполь-дипольной части и короткодействующего потенциала, препятствующего проникновению частиц друг в друга. Для изучения таких систем В.Н. Блиновым проведено компьютерное моделирование методом Монте-Карло ансамблей многих частиц (6000), взаимодействующих попарно.

**Научная новизна** положений, выносимых на защиту, не вызывает сомнений. Практическая ценность работы обусловлена разработкой автором диссертации нового программного обеспечения, позволяющего проводить параллельные расчёты подобных систем на базе суперкомпьютеров. Что позволяет существенно (около  $10^2$ ) увеличить объём изучаемой системы. Значительная часть исследований аналогичных моделей была проведена в 90х годах и оперировала сравнительно малым числом частиц (до 256). В рамках стандартного подхода периодических граничных условий данный метод

эквивалентен рассмотрению кристалла, элементарная ячейка которого содержит моделируемое число частиц. При этом структуры, содержащие большее число частиц, не могли быть изучены, поскольку при моделировании структур порядка ячейки моделирования граничные условия искажают результаты. С другой стороны, структуры, получаемые в рамках экспериментов с ферромагнитными коллоидами, зачастую состоят из частиц, число которых превосходит 256. По этой причине моделирование с использованием современных вычислительных средств является актуальным и позволило получить новые результаты для большего числа частиц. Кроме того, автором разработан новый инструмент, так называемый «параметр локального ориентационного порядка», представляющий особенный интерес с точки зрения численного моделирования и позволяющий проводить интерпретацию и визуализацию результатов исследования, например, построение фазовых диаграмм.

Структура представленной диссертационной работы позволила соискателю изложить свои научные взгляды, сформулировать цели работы и описать методы и результаты исследований в форме, понятной специалистам в различных областях науки. Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка литературы. Первая глава диссертации содержит введение в область исследования и соответствующий обзор литературы. Основные результаты диссертации рассматриваются в последних трёх главах.

Вторая глава акцентирует внимание на вводимом автором параметре локального ориентационного порядка. Эта величина измеряет степень ориентационного ближнего порядка диполей частиц. Основным наблюдением главы является выявленное в моделировании наличие ближнего порядка при низких температурах и его отсутствие при высоких. Важность этого результата состоит в том, что указанная зависимость наблюдается в широком диапазоне

концентраций частиц. Это позволяет сделать предположение о наличии фазового перехода между локально упорядоченным и неупорядоченными состояниями и описать его с точки зрения введённого параметра. Описания, полученные в численных исследованиях предшественников, рассматривали случаи малых, умеренных и больших концентраций как различные задачи. Введённый в диссертационной работе метод, основанный на анализе локального ориентационного порядка, позволяет построить классификацию фаз для разных концентраций в рамках единого подхода. В этом смысле наличие ближнего ориентационного порядка дипольных моментов частиц при низких температурах является инвариантным по концентрации свойством модели дипольных сфер. Это свойство позволяет построить диаграмму системы, классифицировав фазы по наличию или отсутствию локального ориентационного порядка.

Третья глава посвящена обнаружению колончатой фазы при моделировании ферромагнитных жидкостей умеренной концентрации (объёмная доля частиц составляет  $0,15 < \rho < 0,3$ ). Это обстоятельство представляется крайне интересным, поскольку ранее высказывалась гипотеза о возможном наличии подобных структур, однако они не были получены ни в теории, ни в эксперименте. Сегодня ведутся споры о возможности получения подобных структур в эксперименте, и результаты, полученные Блиновым В.Н., позволяют указать диапазон значений, в котором может наблюдаться подобная структура. С этой точки зрения результаты, приведённые в диссертации, могут быть полезны с экспериментальной точки зрения.

В заключительной четвёртой главе приводятся результаты моделирования системы Штокмаера в некотором диапазоне значений физических параметров, и на их основании строится фазовая диаграмма системы при концентрации  $\rho = 0,3$ . Указанная диаграмма приводится в литературе впервые и представляет интерес

с точки зрения дальнейшего теоретического и экспериментального изучения ферромагнитных жидкостей.

Указанные результаты представляют интерес ввиду их **практической значимости** с точки зрения приложения к ферромагнитным коллоидам. Особо отметим тот факт, что в работе приводится оценка области параметров, в которой возможно наблюдение колончатой фазы, что представляет интерес с экспериментальной точки зрения. Полученные в диссертации результаты могут оказать значительное влияние на развитие методов теоретического описания ферромагнитных коллоидных систем. С экспериментальной точки зрения полученные результаты интересны в приложении к следующим проблемам.

Так, указанная работа содержит описание микроскопической структуры фаз ферромагнитных коллоидных систем. Составные части таких образцов (такие как цепочки, кластеры и кристаллические коллоидные структуры) могут использоваться в технологиях производства различных наноустройств. Примером таких устройств могут являться нанороботы, предназначенные для доставки лекарственных средств в различные части человеческого организма или сенсорные системы, использующие магнитные материалы в роли детектора.

Автором также изучена зависимость критической температуры ферромагнитных жидкостей от концентрации. Указанная зависимость позволяет выбирать концентрацию используемых ферромагнитных коллоидов в зависимости от диапазона температур эксплуатации устройства и необходимых свойств жидкости в таких устройствах. Так, в случае уплотнительных устройств изменение концентрации ферромагнитной жидкости приведёт к изменению максимальной рабочей температуры.

Особый интерес представляет вопрос получения и применения колончатой фазы. Автором указан диапазон физических параметров, в котором следует искать рассматриваемую фазу экспериментально. Указанная фаза, по-видимому, будет демонстрировать анизотропные оптические свойства, а потому, подобно

жидким кристаллам, сможет найти применения в качестве рабочего тела приборов различного типа.

**Выводы и положения**, выдвигаемые на защиту, соответствуют содержанию и структуре диссертационной работы. Исследование проведено в рамках единого подхода, основанного на анализе локального ориентационного порядка частиц. Полученные результаты для моделей дипольных сфер крайне интересны и представляют как теоретический, так и практический интерес.

Диссертация и автореферат оформлены аккуратно, написаны понятным языком. Выводы соответствуют содержанию диссертации и тематике публикаций.

Автореферат соответствует структуре диссертации, представленным в ней результатам и выводам. Автореферат и публикации соответствуют теме диссертации.

Работа не свободна от ряда недостатков. Так, по диссертационной работе можно сделать следующие **замечания**:

1. В диссертации не проведена оценка возможности измерения предложенного параметра ориентационного порядка экспериментальными методами.
2. При интерпретации результатов о наличии колончатой фазы желательно было бы проинтерпретировать результат с экспериментальной точки зрения. Также представляется целесообразной оценка возможной структуры такой фазы.

Указанные недостатки не снижают общую высокую оценку работы.

Тема диссертации соответствует научным направлениям, рассматриваемым на Диссертационном совете Д 002.114.01 при Федеральном государственном учреждении науки Институте кристаллографии им. А.В. Шубникова Российской академии наук.

Учитывая актуальность выполненных исследований, научную новизну и практическую значимость результатов можно сделать вывод, что представленная диссертационная работа является самостоятельным исследованием и удовлетворяет всем требованиям **Постановления правительства Российской Федерации о порядке присуждения ученых степеней от 24.09.2013 г. № 842**, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор – Блинов Вениамин Николаевич – заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Результаты диссертации могут быть использованы в профильных научных учреждениях и вузах, в частности на механико-математическом, химическом, физическом, биологическом факультетах Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, Санкт-Петербургском государственном университете, Якутском государственном университете им. М. К. Аммосова, Тверском государственном университете, ИК им. А.В. Шубникова РАН, ИБХ им. М. М. Шемякина и Ю. А. Овчинникова РАН, ИХФ Н.Н.Семёнова РАН, Институте биохимии им. А. Н. Баха РАН, ИФХ им. А. Н. Фрумкина РАН, ИМПБ РАН, ИТЭБ РАН, ИБК РАН, ИВС РАН и др.

Диссертационная работа В. Н. Блинова «Топология фазовых диаграмм ферромагнитных коллоидов с дальнодействующими взаимодействиями» обсуждена, отзыв заслушан и утверждён на заседании семинара Института химической физики им. Н.Н. Семёнова РАН 15.05.2014 (протокол № 1 от 15.05.2014).

Кандидат физико-математических наук,  
старший научный сотрудник ИХФ РАН

К. Б. Терешкина