

ОТЗЫВ

о диссертационной работе Бильданова Эльдара Эмировича
"Моделирование эволюции решеточных систем с конкурирующими взаимодействиями",

представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.02 – теоретическая физика

1. Соответствие содержания диссертации заявленной специальности и отрасли науки

Диссертационная работа Бильданова Э. Э. посвящена изучению процессов релаксации в решеточных моделях систем с конкурирующими взаимодействиями с помощью метода Монте-Карло.

Описание неоднородных неравновесных состояний систем многих частиц и сопутствующих им процессов является одной из наиболее сложных проблем статистической механики. Процесс зарождения новой фазы, структурные превращения в системе относятся к числу вышеотмеченных проблем. Возможность проявления фазовых переходов в физических процессах существенно усложняет их анализ и затрудняет определение различных кинетических параметров, необходимых для понимания закономерностей этих процессов и возможности их практического использования.

Изучение процессов релаксации к равновесному состоянию с учетом пространственных ограничений, является важной задачей в физике конденсированных сред, имеющей не только фундаментальное, но и важное прикладное значение. Ее полное решение связано с преодолением ряда специфических трудностей. Даже при исследовании равновесных свойств и диффузионных процессов при малых градиентах концентрации следует иметь в виду наличие нескольких сильно различающихся масштабов времени, что не позволяет найти аналитическое этой задачи. В этом случае наиболее эффективным является метод модельных гамильтонианов, сформулированный Н.Н.Боголюбовым. В диссертации для решения поставленной задачи используется решеточная модель с учетом взаимодействия двух ближайших соседей.

В работе детально изучены структурные и энергетические эффекты в процессах эволюции двумерных систем с учетом потенциалов притяжения и отталкивания, что позволяет описать эффекты самоорганизации в таких системах.

Таким образом, рассматриваемая диссертация соответствует пунктам 1 (развитие и применение фундаментальных физических теорий и феноменологических моделей для описания различных состояний вещества и физических явлений в них), 4 (статистическая физика и кинетическая теория равновесных и неравновесных систем) и 6 (математические методы теоретической физики) раздела III паспорта специальности 01.04.02 – теоретическая физика, отрасли «физико-математические науки».

2. Актуальность темы диссертации

В настоящее время наблюдается большой интерес к вопросам самоорганизации и самосборки в наноразмерных системах. Такие системы, как правило, обладают богатым разнообразием фазовых состояний. Интерес к ним вызван стремлением получить регулярные микроструктуры с минимальным вмешательством наблюдателя, т. е. «снизу-вверх». Более того, предсказание поведения таких структур в различных условиях и разработка подходов к управлению их свойствами имеет большое значение для современных технологий.

Случаи исследования концентрационной кинетики конденсированных систем при наличии фазовых переходов первого и второго рода немногочисленны, и в них используется, как правило, классическая теория нуклеации, полевые квазитермодинамические методы. Использование решеточных моделей является эффективным при решении задач подобного рода и существенно снижает затраты на проведение дорогостоящих экспериментов с исследуемыми системами.

Диссертация Бильданова Э. Э. выполнена в Белорусском государственном технологическом университете в соответствии с планом НИР кафедры механики и конструирования в рамках выполнения международного проекта CONIN «Effects of confinement on inhomogeneous systems» («Эффекты ограничений в неоднородных системах») программы HORIZON-2020, а также ряда заданий государственных программ научных исследований и хозяйственных договоров. Тема диссертационной работы соответствует приоритетным направлениям, утвержденным Постановлением Совета Министров Республики Беларусь «О приоритетных направлениях научных исследований Республики Беларусь на 2016-2020 годы» от 12 марта 2015 г. № 190 (п. 8. «Многофункциональные материалы и технологии»), приоритетным направлениям, утвержденным Указом Президента Республики Беларусь «О приоритетных направлениях научно-технической деятельности в Республике Беларусь на 2016-2020 годы» от 22 апреля 2015 г. № 166 (п. 6. «Био- и nanoиндустрия») и приоритетным направлениям, утвержденным Указом Президента Республики Беларусь «О приоритетных направлениях научной, научно-технической и инновационной деятельности на 2021-2025 годы» от 7 мая 2020 г. № 156 (п. 1. «Цифровые информационно-коммуникационные и междисциплинарные технологии и основанные на них производства: математика и моделирование сложных функциональных систем (технологических, биологических, социальных)», п. 4. «Машиностроение и инновационные материалы: композиционные и многофункциональные материалы»).

В силу вышесказанного, исследования, представленные в данной диссертационной работе, являются, несомненно, актуальными.

3. Степень новизны результатов, полученных в диссертации, и научных положений выносимых на защиту

Научная новизна диссертации Бильданова Э. Э. заключается в описании моделей систем с учетом притяжения и отталкивания между молекулами в двумерных структурах, а также исследовании равновесных и неравновесных особенностей таких систем. Впервые

– определены термодинамические условия образования концентрических, ламеллярных и спиральных структур в замкнутых системах;

– обнаружен и исследован эффект аномальной адсорбции частиц с конкурирующими взаимодействиями при осаждении их на условно притягивающую инертную подложку;

– установлены и исследованы различные режимы релаксации концентрации и внутренней энергии системы с конкурирующими взаимодействиями.

4. Обоснованность и достоверность выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации

Научные положения, выводы и рекомендации к практическому применению диссертационной работы основаны на постановке корректной формулировки цели и задач исследования. Для моделирования исследуемых систем частиц с конкурирующими взаимодействиями по методу Монте-Карло Бильданов Э. Э. использовал классический алгоритм Метрополиса. Целесообразность использования такого алгоритма для моделирования решеточных флюидов различных типов доказана путем его сопоставления с другими статистико-механическими подходами к исследованию равновесных и транспортных свойств решеточных систем.

Автором показано, что результаты диссертационной работы находятся в полном качественном соответствии с результатами аналитического квазихимического приближения и молекулярной динамики.

5. Научная, практическая, экономическая и социальная значимость результатов диссертации

Научная значимость диссертационной работы Бильданова Э. Э. заключается в разработке и разностороннем исследовании решеточных моделей систем с конкурирующими взаимодействиями. Такие системы обладают тенденцией к образованию упорядоченных кластеров и результаты их исследований могут быть использованы при создании новых наноструктурированных материалов, свойствами которых можно управлять как с помощью граничных условий, так и с помощью внешних воздействий.

Представленные рекомендации к применению отражают практическую и социальную значимость результатов диссертации.

6. Опубликованность результатов диссертации в научной печати

Основные результаты диссертации и выносимые на защиту положения полностью изложены в 10 научных работах, среди которых 3 статьи в научных изданиях, соответствующих п. 19 Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий Республики Беларусь, таких как *Soft Matter*, *Physical Review E*, *Europhysical Journal* и 1 статья в рецензируемом периодическом журнале. Стоит отметить, что статья в журнале *Physical Review E* отмечена редакторским отделом данного журнала как рекомендуемая к прочтению.

Результаты работы прошли неоднократную апробацию на республиканских и международных научных мероприятиях: имеются 6 публикаций в сборниках тезисов докладов на конференциях.

Таким образом, опубликованность результатов диссертации Бильданова Э. Э. соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

7. Соответствие оформления диссертации требованиям ВАК

Диссертация Бильданова Э. Э. содержит введение, общую характеристику работы, четыре главы, три из которых отображают результаты исследований, заключения, списка использованных источников (89 наименований) и списка работ соискателя ученой степени (10 наименований). Общая характеристика работы содержит цели и задачи, научную и практическую значимость полученных результатов, защищаемые положения. Оформление диссертации выполнено в соответствии с требованиями ВАК. Результаты представлены последовательно, текст написан понятным научным языком. Диссертация содержит 42 рисунка и 1 таблицу. Автореферат соответствует основному содержанию диссертации.

8. Замечания по диссертации

Несмотря на достаточно хорошо выполненную работу, следует отметить ряд замечаний и предложений, не влияющих на квалификационные признаки диссертации:

- термин «конкурирующие взаимодействия» представляется не совсем удачным, на самом деле имеет место единый эффективный потенциал взаимодействия между частицами, который на некоторых расстояниях меняет знак, более физичным кажется термин «знакопеременное взаимодействие»;

- выбор коэффициентов в модельном потенциале взаимодействия было бы полезно обосновать, например, с помощью расчета на основе метода функционала плотности;

- текст диссертации содержит ряд аббревиатур, таких как ММК (метод Монте-Карло), ММД (метод молекулярной динамики), МКШ (Монте-Карло шаг) и др. Помимо аббревиатур в главах 2, 3 и 4 немалое количество символов, обозначающих различные характеристики исследуемой системы. Автору следовало бы в таком случае составить «Перечень сокращений и обозначений»;

- в диссертации рассматриваются лишь термоактивированные переходы системы из одного состояния в другое. Представляет интерес рассмотрение других зависимостей, в частности, обусловленных подбарьерными и туннельными переходами.

Приведенные выше замечания не затрагивают основных положений и выводов, содержащихся в диссертации, и не влияют на общую положительную оценку.

9. Соответствие научной квалификации соискателя ученой степени, на которую он претендует

Содержание диссертационной работы Э. Э. Бильданова отражает личный вклад соискателя в опубликованные научные материалы, который состоит в постановке задач исследования, написании и использовании компьютерных программ для моделирования, созданных автором лично, анализе и обсуждении полученных результатов. Бильданов Э. Э. самостоятельно проводил численные эксперименты и обработку результатов. Из анализа содержания работы следует вывод, что соискатель в совершенстве овладел научным подходом к поставленной задаче: способен самостоятельно определиться с выбором подхода к изучению систем любой сложности. Научный уровень публикаций, высокий импакт фактор журналов, в которых

они опубликованы, участие в международных и республиканских проектах по научным исследованиям позволяют сделать уверенное заключение, что научная квалификация соискателя соответствует искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

10. Выводы

Диссертационная работа Бильданова Э. Э. «Моделирование эволюции решеточных систем с конкурирующими взаимодействиями» является завершенной квалификационной работой, соответствующей требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, установленным главой 3 «Положения о присуждении ученых степеней и присвоении ученых званий», и содержит ряд новых результатов по проведенным исследованиям.

По результатам выполненной диссертационной работы Бильданов Эльдар Эмирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика за новые научно-обоснованные и фундаментальные результаты, имеющие важное значение в различных отраслях науки и техники и заключаются в:

- разработке решеточных моделей, пригодных для описания явления адсорбции в системах с конкурирующими взаимодействиями на инертной границе;
- определении условий образования и способов управления упорядоченными структурами в системе с конкурирующими взаимодействиями при наличии пространственных ограничений;
- обнаружении и интерпретации эффекта аномальной адсорбции частиц с конкурирующими взаимодействиями на инертную ограничивающую стенку;
- выявление особенностей эволюции концентрации и внутренней энергии системы частиц с конкурирующими взаимодействиями к их равновесным значениям.

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук, профессор,
главный научный сотрудник кафедры теоретической физики и астрофизики «Белорусского государственного университета»

И. Д. Феранчук

Я, Феранчук Илья Давыдович, даю согласие на публикацию данного отзыва в открытом доступе на официальном сайте Института физики НАН Беларуси

