

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе и  
программам развития, к.ф.-м.н.

  
В.А. Баган

«Октябрь» 2018 г.

М. П.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

федерального государственного автономного образовательного учреждения  
высшего образования  
«Московский физико-технический институт (государственный университет)»

Диссертация Данилова И.В. «Ультразвуковое исследование молекулярных веществ с водородной и молекулярной типами связи в широкой области давлений и температур» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук выполнена на кафедре прикладной физики Московского физико-технического института (государственного университета).

В период подготовки диссертации с 2014 по 2018 г. соискатель Данилов Игорь Владимирович обучался в очной аспирантуре федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)» на кафедре прикладной физики.

В 2014 г. окончил Московский физико-технический институт (государственный университет) по специальности 010900 «Прикладная физика и математика»

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в 2018 г. федеральным государственным автономным образовательным учреждением высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)»

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, академик РАН Бражкин Вадим Вениаминович, директор Института физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН.

По итогам обсуждения диссертации «Ультразвуковое исследование молекулярных веществ с водородной и молекулярной типами связи в широкой области давлений и температур» принято следующее заключение:

### 1. Оценка выполненной соискателем работы

Знание упругих характеристик вещества дает важную информацию о межчастичном взаимодействии. Однако систематическое изучение взаимосвязи упругих свойств и структуры молекул для широкого класса веществ в литературе отсутствует. Таким образом, ультразвуковое исследование упругих характеристик молекулярных веществ в широкой области давлений и температур несомненно

актуально и позволяет рассчитывать на получение новой важной информации о характере межмолекулярного взаимодействия в этих веществах и о роли водородных связей. Цель работы заключалась в ультразвуковом исследовании веществ с молекулярным и водородным типами межчастичного взаимодействия. Для исследования были выбраны вещества, для которых в данном р-Т диапазоне доступны разные агрегатные состояния и модификации. Для достижения поставленных целей соискателем были решены следующие задачи:

1. Отработана технология получения органических стекол, минуя кристаллизацию вещества, в объемных образцах (1-2 см<sup>3</sup>) путем быстрого (~15 К/мин) охлаждения.
2. Получены образцы гигроскопичного соединения – оксида фосфора Р<sub>2</sub>О<sub>5</sub> в атмосфере аргона с последующей герметизацией в камере высокого давления для дальнейшего исследования.
3. Получены стекла с различной термобарической историей – при разных скоростях охлаждения и разных давлениях.
4. Проведены экспериментальные ультразвуковые исследования упругих свойств молекулярных веществ в широкой области давлений и температур.
5. Изучены аномалии объема, скоростей звука, поглощения ультразвука при фазовых превращениях.

## **2. Личное участие соискателя в получении результатов, изложенных в диссертации**

Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Все включенные в диссертацию экспериментальные данные получены лично автором. Соискатель принимал участие в обработке, анализе и обсуждении результатов, изложенных в диссертации, а также в подготовке публикаций в печать.

## **3. Степень достоверности результатов проведенных исследований**

Использованная в экспериментальной части аппаратура многократно тестировалась и имеет достаточную точность для проведения необходимых измерений. Экспериментальные данные обладают хорошей воспроизводимостью при неоднократных сериях экспериментов. Положения и выводы, сформулированные в диссертации, получили квалифицированную апробацию на международных и российских научных конференциях.

## **4. Новизна и практическая значимость, ценность научных работ соискателя**

Физические свойства молекулярных соединений в работах других авторов исследовались различными методами, включая диэлектрическую и рамановскую спектроскопию, нейтронографию, бриллюэновское рассеяние, калориметрию. При нормальном давлении известны большинство характеристик многих глассформеров. Однако под давлением данные вещества исследовались существенно меньше, что связано с ограничением набора применяемых экспериментальных методик. Упругие

свойства молекулярных стеклообразующих веществ под давлением, особенно в стеклообразном состоянии при низких температурах, практически не изучались. Информация об особенностях перехода стекло-жидкость под давлением также достаточно скудна. В данной работе впервые исследованы упругие свойства многих молекулярных глассформеров в стеклообразном состоянии под давлением и при расстекловании. Также впервые были проведены ультразвуковые исследования упругих свойств твердых растворов  $H_2O-D_2O$  в различных молярных концентрациях. Поведение под давлением молекулярных фаз  $P_2O_5$  практически не изучалось в основном из-за их рекордной гигроскопичности. Соискателем была построена фазовая диаграмма оксида фосфора в широком p-T диапазоне.

Модули упругости, являющиеся макроскопическими характеристиками, следует рассматривать как проявление микроскопических межчастичных (межмолекулярных) сил, и экспериментальные данные об упругих свойствах могут быть использованы в качестве важнейших критериев верификации потенциалов для компьютерного моделирования. При исследовании неэргодичности стекол было обнаружено, что их характеристики могут непрерывно изменяться в широких пределах. Давление около 1 ГПа активно используется в промышленности. Следовательно, свойства многих молекулярных стекол могут быть целенаправленно изменены путем изменения параметров их изготовления.

#### **5. Специальность, которой соответствует диссертация**

Содержание диссертации соответствует специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

#### **6. Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем**

Материалы диссертации опубликованы соискателем достаточно полно в следующих работах:

1. E. L. Gromnitskaya, A. G. Lyapin, O. V. Stalgorova, I. V. Danilov, V. V. Brazhkin Ultrasonic study of solid-phase amorphization and polyamorphism in an  $H_2O-D_2O$  (1: 1) solid solution // JETP Letters. – 2013. – № 96. – P. 789–793.

2. V V Brazhkin, E L Gromnitskaya, I V Danilov, Y Katayama, A G Lyapin and S V Popova High pressure behavior of  $P_2O_5$  crystalline modifications: compressibility, elastic properties and phase transitions // Materials Research Express. – 2015. – № 2. – P. 025201.

3. E. L. Gromnitskaya, I. V. Danilov, A. G. Lyapin, and V. V. Brazhkin Influence of isotopic disorder on solid state amorphization and polyamorphism in solid  $H_2O-D_2O$  solutions // Physical Review B. – 2015. – № 92. – P. 134104

4. Igor V. Danilov, Elena L. Gromnitskaya, and Vadim V. Brazhkin Vivid Manifestation of Nonergodicity in Glassy Propylene Carbonate at High Pressures // J. Phys. Chem. B. – 2016. – № 120. – P. 7593–7597

5. A. G. Lyapin, E. L. Gromnitskaya, I. V. Danilov and V. V. Brazhkin Elastic properties of the hydrogen-bonded liquid and glassy glycerol under high pressure: comparison with propylene carbonate // RSC Advances. – 2017. – № 7. – P. 33278-33284

6. I V Danilov, E L Gromnitskaya, A G Lyapin and V V Brazhkin Influence of hydrogen bonding on the elastic properties of molecular glassforming liquids under high pressure // J. Phys.: Conf. Ser. – 2017. – № 950. – P. 042053.

7. I.V. Danilov, A.A. Pronin, E.L. Gromnitskaya, M.V. Kondrin, A.G. Lyapin, and V.V. Brazhkin Structural and Dielectric Relaxations in Vitreous and Liquid State of Monohydroxy Alcohol at High Pressure // J. Phys. Chem. B. – 2017. – № 121. – P. 8203–8210.

Вышеперечисленные опубликованные работы соответствуют теме диссертационной работы и полностью отражают ее содержание.

Диссертация «Ультразвуковое исследование молекулярных веществ с водородной и молекулярной типами связи в широкой области давлений и температур» Данилова Игоря Владимировича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности физико-математические науки, 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Заключение принято на заседании кафедры прикладной физики МФТИ.

Присутствовало на заседании 20 чел.

Результаты голосования: «за» – 20 чел., «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0 чел.

протокол № 5 от «20» 09 2018 г.



Леонов Алексей Георгиевич  
д.ф.-м.н., профессор, зав. кафедрой  
прикладной физики МФТИ