

на автореферат диссертации Куца Дмитрия Анатольевича «Статистико-геометрический анализ структуры однокомпонентных простых жидкостей» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности

01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Диссертационную работу Куца Д.А. следует отнести безусловно к фундаментальным исследованиям. Микроструктура даже простых одноатомных жидкостей привлекает внимание исследователей, поскольку сведения, получаемые из экспериментов по рассеянию рентгеновских лучей и нейтронов, позволяют определить лишь парную корреляционную функцию. А она не отражает многие важные детали микроструктуры. Большие возможности открывает компьютерное моделирование. Сочетание метода молекулярной динамики (или метода Монте-Карло) с итерационными процедурами Шоммерса и Реатто позволяют создавать довольно полную модель структуры жидкости, при этом близость её к реальной структуре контролируется совпадением радиальной функции распределения модельной среды с соответствующей функцией реальной среды. Однако многообразие разупорядоченных модельных сред требует разработки способов определенной их типизации. Именно этой актуальной задаче посвящена диссертационная работа Куца Д.А. Выполненный им анализ разупорядоченных структур путём разбиения пространства среды с помощью симплексов (тетраэдров) Делоне позволил найти определенные закономерности в распределении свободного межатомного пространства. Статистический анализ симплексов Делоне, выполненный автором для всей области существования жидкой фазы, приводит к возможности выделения трёх областей на оси плотности упаковки: область плотной жидкости, переходная область, и область разреженной жидкости. Для плотной жидкости межчастичное пространство разбито на отдельные фрагменты. Уменьшение плотности приводит к объединению фрагментов, и при определенном значении плотности упаковки, равном 0,287, происходит перколяция («просачивание»), что, по-видимому, означает сквозное соединение фрагментов. Это начало переходной области, с которой автор связывает проявление различных особенностей, наблюдаемых в поведении макроскопических свойств. С началом перколяции связано также изменение в характере молекулярного теплового движения. Появляется минимум у корреляционной временной функции скорости, а при дальнейшем уменьшении плотности у неё возникает отрицательный участок. Следует отметить интересный результат: переходные области у ртути и цезия очень сильно различаются. Если у цезия переходная область сосредоточена на участке умеренных температур, то у ртути она располагается в области, близкой к критической температуре. Близость переходной области к критической температуре характерна также для модельной жидкой среды, межмолекулярное взаимодействие в которой

описывается потенциалом Леннарда-Джонса. Это обстоятельство подчеркивает тот факт, что различие в свойствах металлов, принадлежащих разным группам, оказывается иногда большим по сравнению с теми различиями, которые имеются между свойствами определенных групп металлов и свойствами диэлектрических жидкостей. Во всяком случае указанное выше различие в характере изменения с температурой структур цезия и ртути коррелирует с различием их поведения в области перехода металл-неметалл.

В порядке небольшого замечания можно отметить присутствие в тексте не вполне ясного утверждения, что «в жидкой фазе вблизи бинодали зависимость изохорной теплоемкости имеет минимум в области переходных структур». Что значит вблизи бинодали? На изобарах теплоемкость тоже будет иметь минимум. Если же важно подчеркнуть, что переходная область начинается именно на участке минимума на линии сосуществования, то так и следовало сказать. Это замечание, конечно, не снижает значимости работы. Достоинством разработанного автором метода анализа структуры однокомпонентных жидкостей является пригодность его для использования во всей области существования жидкой фазы. Диссертация включает большой объем расчетного материала. Выводы диссертации следует считать достаточно обоснованными. Большой объем полученного материала и квалифицированный его анализ позволяет сделать вывод о том, что выполненная работа удовлетворяет условиям ВАК, а автор заслуживает присвоения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Канд. физ-мат. наук, доцент

Л.А.Благонравов

кафедры молекулярной физики Физического
факультета МГУ им. М.В.Ломоносова. 119991,
г. Москва, ГСП – 1, Ленинские горы, д.1, стр. 2,
Физический факультет. Тел.: 8(495)939-43-88.
E-mail: blagonravovla@mail.ru

Подпись кандидата физико-математических наук Благонравова Льва Александровича удостоверяю



Росов / Росова М.С.