

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Куц Дмитрия Анатольевича «**СТАТИСТИКО-ГЕОМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СТРУКТУРЫ ОДНОКОМПОНЕНТНЫХ ПРОСТЫХ ЖИДКОСТЕЙ**», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Актуальность. Задача исследования структуры неупорядоченных систем наиболее трудная и важная для понимания природы образования веществ в аморфном и твердом состоянии. При этом очень широкий класс для неупорядоченных веществ составляют простые жидкости, т.е. те жидкости, в которых принимают парную потенциальную функцию взаимодействия между частицами основной. Расплавы металлов относят к простым жидкостям, но изучение их структуры от этого не становится простым. Здесь наблюдаются аномалии различных физических свойств в широком интервале температур, а влияние структурных изменений до сих пор имеет труднообъяснимую природу. Существует несколько подходов к изучению структуры:

1. Прямые методы, которые дают интегральную характеристику центров рассеяния;
2. Косвенные методы, которые учитывают внешние условия и по ним оценивают изменение структурных параметров;
3. Методы машинного (компьютерного) эксперимента, позволяющие серьезно продвинуться в изучении структуры жидкости.

Соискателем выбран третий путь, путь компьютерного моделирования для установления статистико-геометрических закономерностей в структуре однокомпонентных простых жидкостей в широком диапазоне существования жидкой фазы. Это современный подход к решению подобных актуальных задач. Изучение структуры, её анализ и свойства именно в жидкой фазе, актуально и востребовано всегда.

Научная новизна не вызывает сомнений, поскольку впервые выполнены расчеты и на их основе обнаружена связь между статистико-геометрическими параметрами, характеризующими структуру, и особенностями температурных зависимостей их физических свойств. Автор разработал метод анализа атомной структуры простых жидкостей, применяя один из перспективных подходов для решения такого рода задач: статистико-геометрический анализ

многогранников Вороного и симплексов Делоне. Здесь можно определить основную доминанту в структуре моделируемой системы и её эволюцию при изменении внешних условий. Что было и сделано. Для простых жидкостей вдали от точки плавления обнаружена связь между изменением атомной структуры и поведением динамических характеристик системы.

Научная и практическая ценность, достоверность результатов.

Соискателем предложен метод анализа структуры однокомпонентных простых жидкостей. При этом рассматривались системы с разными потенциалами межчастичного взаимодействия: **Cs, Rb, Hg, Fe, Ga, Au**. Обнаружено, что в простых жидкостях происходит качественное изменение структуры, которое может дать аномалии и проявляется в нетипичном поведении атомных и электронных свойств.

Это обстоятельство обязательно должно учитываться при формировании новых технологий с использованием жидкой фазы. Здесь диссертантом показана ценность его работы как с научной, так и с практической стороны. Достоверность результатов подтверждается многократным тестированием, теоретическими и экспериментальными данными других авторов (есть ссылки в автореферате), а так же использованием апробированных методов компьютерного моделирования: Монте-Карло (МК), Молекулярной Динамики (МД).

Замечания по автореферату.

1. Автор широко использует компьютерный эксперимент. На стр. 11 автореферата читаем: «..Модели были построены методом молекулярной динамики в NVT ансамбле...». При этом не указывается, какой программный комплекс использовался для расчетов. Если это своя разработка, то необходимо тестирование программ, иначе трудно поверить результатам. Если это известные пакеты программ, то необходима ссылка на авторов. Ни того, ни другого в автореферате нет.
2. На стр. 14-15 автореферата, автор определяет границы областей с различной структурой вблизи линии равновесия жидкость-газ. Показывается, что для Cs переход от плотных систем к разреженным сопровождается изменением поведения сдвига Найта. Поскольку сдвиг Найта пропорционален магнитной восприимчивости электронов, то её поведение тоже должно измениться. Эту особенность хорошо можно проиллюстрировать расчётом функции плотности электронных

состояний в исследуемых металлах. Автор про эту функцию вообще забыл. Для металлов такой подход обедняет исследование.

Заключение.

Диссертационная работа Д.А. Куц, как всякое научное исследование, связанное с решением сложной научно-технической задачи, не могло избежать ряда недостатков, которые, однако, не снижают научной значимости и ее практической ценности. Считаю, что диссертационная работа Дмитрия Анатольевича Куц в виду актуальности темы, научной новизны и практической значимости полученных результатов удовлетворяет требованиям Положения ВАК РФ о порядке присуждения ученых степеней, предъявляемых к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «физика конденсированного состояния».

Заведующий кафедрой Информационных Систем и Технологий
Вологодского государственного университета, доктор физико-математических наук, профессор
Вячеслав Алексеевич Горбунов



160014, г. Вологда, Ул. Некрасова, д. 65, кв. 25
т. +7 921 234 50 65, e-mail: vagor@mh.vstu.edu.ru

ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ
Менеджер по персоналу
отдела кадров
Управления делами

(Т.А. Худякова)