

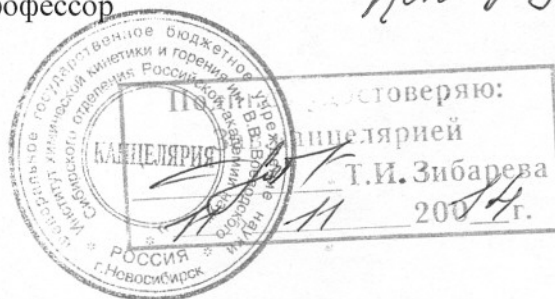
ОТЗЫВ  
на автореферат диссертации **Куца Д.А.**  
«Статистико-геометрический анализ структуры однокомпонентных  
простых жидкостей»

Диссертация Д.А.Куца посвящена разработке и применению нового метода анализа структуры простых жидкостей. Автору со своими коллегами удалось сказать новое слово в области статистической геометрии – предложенного Берналом метода анализа структуры жидкостей на основе разбиения пространства на многогранники Вороного и симплексы Делоне. В нашей лаборатории в Новосибирске мы много лет занимались этим методом, изобретая количественные характеристики различных структурных образований. Но предложение наших челябинских коллег оказались для нас совершенно новыми и неожиданными, открывающими новый аспект метода статистической геометрии. Диссертант с соавторами предложили характеризовать форму симплекса Делоне по числу пересечений его симплицальной сферы с такими сферами в соседних симплексах. Имеется всего пять типов таких форм, и их легко выделить в компьютерных моделях. Эта идея открывает новый эффективный метод исследования межатомного пространства в веществе. И в диссертации Д.А.Куца показаны возможности этого метода для описания структурных изменений в простых жидкостях при вариации плотности и температуры в широких пределах от газа до твёрдого тела. Рассмотрены как модельные системы (с потенциалом твёрдых сфер и Леннард-Джонса), так и ряд металлических расплавов. Специфическое изменение доли разного типа симплексов позволяет во всех случаях определить чёткую границу между жидкостью и газом. Эта граница оказалась лежащей при значительно большей плотности, чем линия Видома, которая обычно считается границей между жидкоподобным состоянием и газом. Я считаю это важным результатом, достойным дальнейшего изучения. Автор обнаружил специфическое поведение введённых им характеристик симплексов Делоне в разных системах и сравнил их поведение с другими физическими свойствами объектов. Но мне хочется подчеркнуть методологическую ценность диссертации, демонстрирующую эффективность нового инструмента статистической геометрии.

Диссертация Д.А.Куца производит очень хорошее впечатление и, несомненно, удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук, а её автор достоин искомой степени.

Доктор химических наук,  
профессор

Наберухин Ю.И.  
7.11.2014.



Наберухин Юрий Исаевич, главный научный сотрудник Института химической кинетики и горения им. В.В.Воеводского СО РАН, Новосибирск. 630090, ул. Институтская 3. Тел. 383-333-27-58, e-mail: naber@kinetics.nsc.ru.