

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу
**Куца 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

Жидкое состояние является на сегодняшний день наименее изученным из агрегатных состояний вещества. Это обстоятельство обычно связывают с отсутствием внятного нулевого приближения для его описания. Даже однокомпонентные простые жидкости в зависимости от их удаленности от характерных точек (точка плавления, критическая точка) трактуются с совершенно разных позиций (квазигазовые и квазикристаллические модели).

В связи с указанными обстоятельствами можно только приветствовать появление и развитие новых моделей жидкого состояния, одна из которых положена в основу диссертационной работы Д.А. Куца. Она предполагает выделение в жидкости так называемых симплицальных полостей, касательных к атомным сферам симплексов Делоне, и анализ возможности их взаимного пересечения с различным числом соседних полостей. Основоположниками этого подхода являются Б.Р. Гельчинский и научный руководитель диссертанта А.Г. Воронцов. Их первая публикация, посвященная изложению метода анализа структуры жидкостей, датирована 2004 г., то есть она появилась буквально накануне начала научной деятельности диссертанта.

В мои обязанности не входит анализ метода Гельчинского – Воронцова. Отмечу только, что в алгоритме его реализации есть ряд не вполне обоснованных, с моей точки зрения, моментов. Диссертация Д.А. Куца посвящена последовательному применению данного метода к анализу структурных изменений широкого класса модельных жидкостей (тведосферная жидкость, леннард-джонсовская жидкость, жидкие металлы) в широчайшем диапазоне их плотностей. Ни одна из ранее предложенных теорий жидкого состояния даже не претендовала на охват такого диапазона. В ходе выполнения работы Д.А.Куц на множестве примеров показал связь таких разнородных свойств жидкостей, как автокорреляционная функция скоростей, коэффициент диффузии, теплоемкость, сдвиг Найта, удельная магнитная восприимчивость, адиабатический термический коэффициент

давления, скорость звука и др. с характерными областями существования вакансионной подсистемы. Эти результаты, по-видимому, снимают высказанные выше сомнения в обоснованности метода Гельчинского-Воронцова. Таким образом, **актуальность работы Д.А. Куца не вызывает сомнений.**

Говоря о квалификации диссертанта, могу обратить внимание Ученого совета на освоение им обширного комплекса компьютерных программ и создание новых программ, потребность в которых появлялась в ходе выполнения работы. Для проведения расчетов по ним Д.А. Куцу пришлось овладеть методикой программирования и проведения расчетов на компьютерном кластере – сравнительно новом элементе современной вычислительной техники. Судя по тексту диссертации, он был вполне подготовлен к этой сложной работе.

Научная новизна

Исходя из результатов статистико-геометрического анализа модели, диссертант разбил область существования жидких металлов на три подобласти. В первой из них вакансии являются изолированными, в третьей наблюдается слияние вакансий (так называемый перколяционный переход). Эти области разделены переходной подобластью. При всей кажущейся искусственности такого деления, оно оказалось чрезвычайно информативным. Выяснилось, что в каждой из этих областей преобладают симплициальные полости различных порядков. Кроме того, в них обнаруживаются и полости более высоких порядков, очевидно, связанные с потерей дальнего упорядочения при плавлении. Обнаружилась весьма убедительная корреляция между положением границ этих областей и поведением широкой гаммы перечисленных выше свойств разнородных жидкостей. Этот результат выдвигает поведение вакансионной подсистемы на роль ведущего фактора, определяющего структуру объектов и связанные с ней характеристики. Оппоненту представляется, что *это утверждение является наиболее важным результатом проведенного Д.А. Куцем исследования.*

Научная и практическая ценность работы

В физике металлических жидкостей в течение последних 50 лет обсуждается вопрос о возможности существенных структурных изменений в них в сравнительно узких температурных интервалах (аналог фазового перехода в твердом теле). После работы Д.А.Куца становится очевидным наличие как минимум одного универсального перехода, происходящего при слиянии вакансий не только в металлических, но даже и в таких

простых жидкостях как твердосферная или леннард-джонсовская. В частности, им впервые показано, что переход к разреженным системам сопровождается исчезновением аномальной положительной дисперсии звука и изменением автокорреляционной функции скорости. Впоследствии к этим же результатам пришел В.В. Бражкин на основе анализа особенностей изменения динамики частиц в сверхкритической области температур.

Таким образом, вполне обоснованным выглядит претензия диссертанта на то, что в его работе «Развит новый метод анализа структуры одноатомных простых жидкостей, обладающий количественной точностью и общностью для систем с разными потенциалами межчастичного взаимодействия. Его использование позволило обнаружить качественное изменение структуры простых жидкостей, которое проявляется в нетипичном поведении некоторых атомных и электронных свойств».

Приведенные выше соображения делают, на мой взгляд, несомненной диссертательность рецензируемой работы. Она существенно обогащает научное направление, созданное его научным руководителем, и которое, по мнению рецензента, можно определить как исследование топологии вакансионной подсистемы жидкостей с целью описания их свойств во всем интервале существования жидкой фазы.

Замечания по диссертационной работе:

1) В число задач исследования диссертант включает *разработку* метода анализа атомной структуры простых жидкостей, основанного на разбиении Вороного – Делоне и пригодного для изучения систем любой плотности. Корректнее было бы указать, что работа посвящена *развитию* такого метода (как это было сформулировано в одном из разделов автореферата), поскольку, как указывалось выше, суть этого метода была впервые опубликована Б.Р. Гельчинским и А.Г. Воронцовым без участия Д.А. Куца.

2) Первая глава диссертации написана в устаревшем стиле литературного обзора и не завершается четкой формулировкой целей и задач диссертационного исследования.

3) В работе недостаточно четко сформулирован раздел «Рекомендации по использованию научных выводов». Данный раздел Д.А. Куца заключает расплывчатой фразой: «Это должно учитываться при разработке теоретических основ технологий, использующих жидкую фазу при таких условиях». Что именно? При каких условиях? – из текста не ясно.

4) Есть и частные замечания по тексту работы. В частности, оппоненту, не являющемуся специалистом в использовании синхротронного рентгеновского излучения для изучения свойств жидкостей, не ясно, каким образом с его помощью исследуется аномальная дисперсия звука (с. 83). То же касается и неупругого рассеяния рентгеновского излучения. Думается, в диссертации можно было хотя бы мельком коснуться этих вопросов.

5) Не ясен смысл высказывания, приведенного в работе на с. 45. Там говорится, что «Для описания межатомного пространства всей модели в целом предлагается использовать параметры: n_i – доли симплексов (и соответственно симплициарных сфер) со значением параметра $n = i$, взятой от полного числа симплексов. Также для удобства будем говорить, что некоторый симплекс является симплексом n_i , если для него $n = i$ ».

Вышеперечисленные замечания ни в коей мере не носят принципиального характера, а касаются только принятой диссертантом манеры изложения. Проведенное Д.А. Куцем исследование является существенным вкладом в физику конденсированного состояния, за которым неминуемо должны последовать новые работы в направлении изучения вакансионной подсистемы жидкостей и обоснования выбранной компьютерной модели. Личный вклад диссертанта превышает требования, предъявляемые к кандидатским диссертациям по указанной специальности, что позволяет рассчитывать на последующее развитие данной тематики.

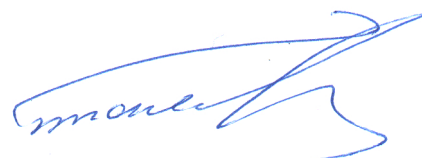
Научные положения, выводы и рекомендации, содержащиеся в диссертации, обладают достоверностью, новизной и обоснованностью. Поэтому они должны приниматься во внимание специалистами, изучающими структуру и свойства жидких систем различной природы. Результаты этой работы хорошо апробированы на 9 международных и российских конференциях и опубликованы в 9 печатных работах, 6 из которых – статьи в журналах, входящих в перечень ВАКа. Автореферат точно и полно отражает содержание диссертации.

Заключение

Диссертация Куца Д.А., несмотря на отмеченные выше недостатки, является законченным самостоятельным научным исследованием, посвященным актуальной

проблеме. Она содержит новое научно-обоснованное решение важной проблемы – выявление особенностей структурных изменений в однокомпонентных простых жидкостях. Считаю, что в целом диссертация отвечает квалификационным требованиям, установленным в п. 9 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а ее автор Куц Дмитрий Анатольевич заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент, профессор кафедры физики
и математического моделирования Уральского
государственного педагогического университета,
620017, Екатеринбург, пр. Космонавтов, 26,
Заслуженный деятель науки РФ,
профессор, д.ф.-м.н. Попель Петр Станиславович,
рабочие телефоны: (343) 371-46-56, (343) 371-50-66.
e-mail: pspopel@mail.ru



30 октября 2014 г. г.Екатеринбург



Подпись *П. С. Попель*

Заверяю инсп. ОК УрГПУ

В. М. Кавагучи