

О Т З Ы В

**на автореферат диссертации Куца Дмитрия Анатольевича
«Статистико-геометрический анализ структуры однокомпонентных простых жидкостей», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния**

Сверхкритическим флюидом называется вещество при температуре и давлении, превышающих критическую точку, то есть в области, где не существует термодинамических различий между жидкостью и газом. Одной из распространенных точек зрения является утверждение, что между этими агрегатными состояниями вообще нет качественных различий. Между тем, такой подход является устаревшим и не соответствует современным представлениям о структуре конденсированных сред. Хорошо известно, что вблизи температуры плавления жидкость обладает ярко выраженным ближним порядком, зачастую наследованным от исходного кристалла. С другой стороны, достаточно очевидно, что при достаточно высоких температурах и (или) низких плотностях ближний порядок должен разрушаться. Возникают естественные вопросы: существует ли на фазовой диаграмме некоторая линия (или область), условно разделяющая «кристаллоподобную» структурированную жидкость и бесструктурный квазигазовый флюид? Каково положение этой линии (области)? Сопровождается ли ее пересечение какими-либо термодинамическими проявлениями? Каково различие в динамике движения атомов по обе стороны этой линии? Ответы на эти вопросы имеют фундаментальное значение для физики конденсированного состояния и очень активно обсуждаются в последние годы. В связи с этим, диссертационная работа Куца Д.А., посвященная изучению эволюции структурных и динамических свойств сверхкритических флюидов, является актуальной.

В работе методами молекулярной динамики изучены структурные характеристики ряда модельных и реальных систем в области термодинамических параметров, соответствующих жидкости и флюиду. Автором разработана оригинальная методика анализа структуры неупорядоченных сред, являющаяся усовершенствованием метода Вороного-Делоне. С помощью данной методики были обнаружены качественные изменения топологических структурных характеристик сверхкритических флюидов, происходящие в достаточно узкой области, положение которой хорошо согласуется с областями, где претерпевают качественные изменения различные динамические и термодинамические характеристики. Полученные в работе результаты имеют несомненную научную ценность, поскольку дают вклад в понимание структуры неупорядоченных конденсированных сред и механизмов ее эволюции в сверхкритической области.

Таким образом, диссертационная работа Куца Д.А. по актуальности, научной новизне и уровню проведенных исследований удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по физико-математическим наукам, а ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук.

06.11.2014

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник лаборатории
аналитической химии, Института Металлургии УрО РАН,
620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, 101,
рабочий телефон: (343) 232-91-04
e-mail: rrylcev@mail.ru

Подпись Рыльцева Р.Е. заверяю
Ученый секретарь ИМЕТ УрО РАН, к.х.н.



Рыльцев Роман Евгеньевич

Пономарев В.И.