



УТВЕРЖДАЮ

Ректор ФГБОУ ВПО «ЧелГУ»
доктор психологических наук,
профессор

Д.А. Циринг

« 31 » октября 2014 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Челябинский государственный университет» 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 в диссертационном совете Д 212.298.04 при ФГБОУ ВПО «Южно-Уральский государственный университет» (НИУ)

Диссертация Куца Д.А. посвящена изучению структурных изменений в жидкой фазе простых систем вдали от точки плавления. Задача описания таких изменений не является тривиальной, поскольку структуры неупорядоченных систем нельзя классифицировать так, как это было сделано для кристаллических решеток. Устоявшаяся точка зрения на структурные изменения в жидкой фазе систем со сферически симметричным характером межчастичного взаимодействия состоит в том, что подобные изменения происходят постепенно и носят количественный характер. Однако существует набор опытных данных, указывающих на существование аномалий температурных зависимостей свойств простых жидкостей. Фундаментальный вопрос заключается в том, какие структурные изменения в жидкости сопровождают эти аномалии физических свойств. Диссертационная работа Куца Д.А. является шагом в определении зависимости физических свойств от структуры расположения атомов неупорядоченных веществ, которая с достаточной достоверностью может быть получена с помощью современных методов компьютерного моделирования, вследствие этого работа Куца Д.А. **является актуальной.**

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы из 127 источников. Общий объем диссертации составляет 119 страниц, включая 49 рисунков и 8 таблиц.

В первой главе представлен литературный обзор эволюции представлений о структуре жидкости, начиная с работ Ван-дер-Ваальса и

Дебая, и заканчивая современными представлениями. Обзор достаточно полон и объективен, вполне отражает современное состояние вопроса.

Во **второй главе** рассматривается развиваемая автором методика анализа структуры неупорядоченных систем различной плотности. Она опирается на способ анализа геометрии и топологии межчастичного пространства, предложенный ранее в ЮУрГУ А.Г.Воронцовым и Б.Р.Гельчинским. В качестве структурных параметров здесь берется число пересечений n симплициальной сферы построенной для данного симплекса Делоне, с симплициальными сферами его соседей. Это число изменяется случайным образом от 0 до 4 и служит мерой локального порядка в жидкости. В работе выясняются условия, выполнение которых надо потребовать при компьютерном моделировании жидкости для обеспечения надежности получаемых статистических оценок параметра n_i ($i = 0, \dots, 4$). В конце главы делается сравнение предложенной методики с известными ранее. В выводах указывается на достоинства метода: 1) небольшое число целочисленных параметров (пять), 2) работоспособность в широком интервале плотностей.

В **третьей главе** методика применяется для анализа структуры простейших моделей жидкости (жидкости из твердых сфер и жидкости Леннарда-Джонса) в зависимости от их плотности. Для изучения жидкости твердых сфер разработана оригинальная методика и программа. С помощью численных экспериментов выбраны параметры моделирования (число частиц в ячейке, длина фазовой траектории), обеспечивающие статистическую надежность результатов. Отмечается сходство в поведении структурных параметров этих моделей с изменением плотности и указывается на корреляцию в положении точек на диаграмме состояния, где происходит переход $n_3 - n_4$ от плотной жидкости к рыхлой, с точками, где наблюдаются особенности в поведении физических свойств.

В **четвертой главе** рассматриваются модели металлических систем: щелочных (Cs, Rb), переходных (Fe, Hg), благородных (Au) и легких металлов (Ga). Модели построены по опытным данным о структуре расплавов, полученным в экспериментах по дифракции рентгеновских лучей методами Шоммерса и обратного Монте-Карло. В результате исследования было показано, что при приближении к критической точке вдоль кривой равновесия жидкость – газ все рассмотренные расплавы сходным образом изменяют свою атомную структуру, если о последней судить по изменению предложенных в работе структурных параметров. Наиболее важным итогом главы, а также и всей диссертации, является установление корреляции в положении областей, где происходит смена одной структуры на другую, с областями, где на опыте наблюдается изменение характера поведения физических свойств: магнитной восприимчивости, сдвигов Найта, аномальной дисперсии звука, адиабатического термического коэффициента давления.

Научная новизна работы заключается в обнаружении вдали от точки плавления универсальной связи между структурой простых систем, находящихся в жидкой фазе, и их физическими свойствами.

В работе получен ряд новых научных результатов, среди которых необходимо отметить:

1. Разработан новый метод анализа структуры неупорядоченных систем, основанный на исследовании геометрических свойств межчастичного пространства и пригодный для систем с низкой плотностью.

2. Исходя из особенностей микроскопического строения жидкой фазы, для всех исследованных простых систем на их фазовых диаграммах были выделены три области, положение границ между которыми хорошо соответствует особенностям на температурных и плотностных зависимостях физических свойств.

Научная и практическая ценность работы заключается в возможности предсказания особенностей физических свойств простых систем, находящихся в жидкой фазе и в состоянии сверхкритического флюида, на основе анализа их структуры с помощью развитого автором метода. Для многих представляющих практический интерес расплавов (например, расплав галлия, который используется как высокотемпературный теплоноситель) представленный в работе метод позволяет прогнозировать положение вблизи бинодали минимума молярной теплоемкости. Необходимо отметить, что простые системы при термодинамических параметрах, характерных для жидкостей вблизи критической температуры и сверхкритических флюидов, сейчас активно применяются в различных производственных процессах: используются как высокотемпературные теплоносители, а также в технологиях сверхкритической экстракции.

Достоверность проведенного исследования обеспечивается использованием хорошо апробированных методов математического моделирования (метод молекулярной динамики и метод Монте-Карло). Для получения Леннард-Джонсовских моделей в работе был использован хорошо зарекомендовавший себя программный пакет LAMMPS. Все рассматриваемые в работе модели металлических расплавов соответствовали результатам дифракционных экспериментов. Полученные в данной работе данные о структуре различных веществ подтверждаются теоретическими работами и экспериментальными результатами других авторов.

К наиболее **важным научным результатам** диссертационной работы следует отнести:

1. Разлит и всесторонне исследован метод анализа структуры, основанный на изучении геометрии межатомного пространства системы. Необходимо отметить, что данный метод структурного анализа позволяет сравнивать структуры систем различной природы и атомной плотности, а

также обладает высокой чувствительностью к структурным изменениям, происходящим при малых плотностях.

2. Данный метод, апробированный на атомных моделях различных жидких металлов, показал наличие корреляции между изменением атомной структуры моделей и изменениями различных физических свойств, наблюдаемыми в металлах экспериментально.

Замечания по диссертационной работе

1. В части 1 главы 3, посвященной молекулярно-динамическому моделированию системы твердых сфер, сказано, что термостатирование системы проводилось путем масштабирования скоростей частиц. Однако известно (см. например, Verendsen et al, J. Chem. Phys., V.81, pp. 3684 (1984)), что простое масштабирование скоростей не приводит к каноническому ансамблю и дает приемлемые результаты в случае рассмотрения систем из сотен тысяч частиц. Автор, однако, в главе 3 использует молекулярно-динамические модели твердых сфер, состоящие всего из 4000 частиц.

2. Исследования третьей и четвертой глав работы представляются несколько оторванными друг от друга. В третьей главе расположение атомов рассчитывается чисто теоретически, а в четвертой на входе используются только экспериментальные данные, причем рассматриваемые системы отличаются. Непонятно, почему не была предпринята попытка молекулярно-динамического моделирования структуры металлических расплавов при помощи того же пакета LAMMPS.

Отмеченные замечания **не снижают** общей высокой оценки диссертационной работы, которая представляет собой законченное исследование на актуальную тему, выполненное на высоком научном уровне. Автором получена новая научная и практически значимая информация о структурных изменениях, происходящих в простых системах, и их связи с поведением физических свойств.

По материалам диссертации опубликовано 9 научных работ, включая 6 статей в журналах рекомендованных ВАК. Научные публикации достаточно полно отражают основное содержание диссертации. Содержание автореферата в полной мере соответствует содержанию диссертации.

Результаты, полученные в диссертации, могут быть использованы в научных учреждениях, занимающихся исследованиями свойств металлических расплавов и других веществ, находящихся при высоких температурах и давлениях.

Заключение. Все вышеизложенное позволяет сделать вывод, что в целом диссертация Куца Д.А. «Статистико-геометрический анализ структуры однокомпонентных простых жидкостей», несмотря на отмеченные недостатки, является законченным самостоятельным научным исследованием, посвященным актуальной проблеме. Она содержит новое

научно-обоснованное решение важной проблемы – описание структурных изменений, происходящих в жидкой фазе простых систем вдали от точки плавления. 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.

Содержание работы было заслушано на семинаре физического факультета, расширенном семинаре кафедры теоретической физики ФГБОУ ВПО «ЧелГУ» 16 октября 2014 года.

Отзыв на диссертацию рассмотрен и утвержден 27 октября 2014 года на заседании кафедры общей и прикладной физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Челябинский государственный университет», протокол № 02.

Руководитель семинара,
заведующий кафедрой теоретической физики
ФГБОУ ВПО «ЧелГУ»,
доктор физ.-мат. наук, профессор

А.Е. Дудоров

Заведующий кафедрой общей и прикладной физики
ФГБОУ ВПО «ЧелГУ»,
доктор физ.-мат. наук



А.Е. Майер

Подпись удостоверяю
Начальник отдела кадров
Т.Б. Смашникова

31.10.2014

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Челябинский государственный университет» (ФГБОУ ВПО «ЧелГУ»)

454001, г. Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129

тел. (351) 799-71-01;

факс: (351) 742-09-25

e-mail: odou@csu.ru