

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

Диссертационная работа посвящена изучению структуры неупорядоченных систем. Интерес к данной проблеме вызван тем, что в последнее время открываются все новые типы конденсированных веществ, которые занимают промежуточное положение между кристаллом и жидкостью, совершенствуются экспериментальные методы их изучения, обнаружено необычное поведение веществ при экстремальных давлениях, а также при пониженных плотностях вблизи критической точки и в области сверхкритического флюида. Развитие новых теоретических подходов связано главным образом с ростом вычислительных возможностей благодаря использованию параллельных вычислений и методов компьютерного моделирования. Исследование многих систем, например наноструктур, затруднено из-за того, что они являются метастабильными. В связи с этим растет интерес к изучению структуры жидкости, которая еще далеко не исследована во всей области ее существования, с использованием новых возможностей. Поэтому **работа Д.А. Куца является актуальной**, так как в ней ставится задача разработки нового подхода для исследования структуры однокомпонентных жидкостей с разным типом межчастичного взаимодействия (твердосферная жидкость, жидкость с потенциалом Леннарда-Джонса и жидкие металлы), основываясь на оригинальной идее статистического анализа геометрии свободного межатомного пространства, рассчитывая координаты частиц методами Монте-Карло и молекулярной динамики.

Научная новизна диссертации заключается в разработке нового метода анализа структуры однокомпонентных простых жидкостей на основе статистико-геометрического анализа многогранников Делоне путем построения вписанных симплициальных сфер и вычисления доли сфер пересекающихся с соседними сферами n раз. Поскольку количество пересечений может принимать только целочисленные значения от 0 до 4, то для любой жидкости задача сводится к исследованию пяти величин, которые должны быть определены для каждого исследуемого состояния. На основе анализа введенных автором величин дана универсальная классификация, которая делит все типы жидкостей на плотные, переходные и разреженные. Показана корреляция этих величин со свойствами жидкостей и положением аномалий на электронных и атомных свойствах. Особенно впечатляет совпадение рассчитанной в работе границы между «газоподобным» и «жидкоподобным» состояниями с появлением экспериментально обнаруженной аномальной дисперсией звука в Леннард-Джонсовских жидкостях. Укажем, что предложен нетривиальный метод определения атомных радиусов в системе по заданным координатам центров атомов, который заключается в «раздувании» атомов и вычислении таких размеров, при которых происходит касание соседних атомов.

Научная и практическая ценность работы состоит в разработке количественного метода анализа структурных особенностей жидкостей, установлению необходимых параметров расчета для получения статистически значимых результатов (количество частиц в модели, шагов по времени и др.) и прогнозирование поведения свойств в экстремальных состояниях.

Достоверность результатов, полученных в работе обеспечивается использованием надежных и широко используемых методов компьютерного моделирования и проведение необходимого количества усреднений для получения статистически значимых данных при обработке результатов, а также сравнением результатов с данными других авторов и опытными

данными. Следует особо отметить огромное количество и тщательность вычислений, которые проведены для каждой исследуемой системы для огромного числа из области допустимых термодинамических параметров.

Замечания по диссертационной работе:

1) Диссертационная работа посвящена исследованию простых жидкостей с парным потенциалом взаимодействия. Представляется, что часть выбранных объектов исследования среди жидких металлов, такие как Fe, Hg и, особенно, Ga, имеют сильно выраженную ковалентную составляющую и не относятся к простым жидкостям.

2) Вывод, сделанный в разделе 2.3 диссертации о форме симплексов с различным значением параметра n , основывается лишь на данных, полученных для одного жидкого металла, а именно Hg. Справедливо ли это утверждение для остальных жидких металлов и систем с другим типом парного взаимодействия?

3) Данные для координат атомов, которые анализируются в главе 3, получены для модели твердых сфер и Леннард-Джонсовской жидкости с помощью достоверных методов Монте-Карло и молекулярной динамики. В главе 4 для получения координат атомов жидких металлов использованы рекурсивные процедуры путем подгонки к экспериментальным парным корреляционным функциям. Насколько выбранный подход вносит неоднозначность в полученные результаты? В качестве пожелания выскажем следующее: в последующей работе подтвердить эти результаты прямым моделированием.

Приведенные выше замечания не носят принципиального характера и не умаляют высокой оценки диссертационной работы. Диссертация изложена ясным физическим языком, выполнена на высоком уровне и представляет собой законченное научное исследование на актуальную тему.

Результаты этой работы 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 незначительные недостатки, является законченным самостоятельным научным исследованием, посвященным актуальной проблеме. Она содержит новое научно-обоснованное решение важной задачи – построить универсальную модель изменения структуры для жидкостей с разным типом межчастичного взаимодействия на основе статистического анализа геометрии сводного межатомного пространства во всей области термодинамических параметров.

Представленная диссертационная работа в целом 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.

31.10.2014

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник лаборатории порошковых, композиционных и нано-материалов Института металлургии УрО РАН, 620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101, рабочий телефон: (343) 232-90-78, e-mail: yurev_anatolii@mail.ru



Юрьев Анатолий Аркадьевич

Подпись Юрьева А.А. заверяю.

Ученый секретарь

Института металлургии УрО РАН, к.х.н.



В.И. Пономарев