

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Воронцова Александра Геннадьевича «Структурообразование в простых металлических системах в жидкой фазе и при переходе пар-жидкость», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Актуальность

Достоинства новых технологий в последнее время неразрывно связаны с возможностью использования принципиально новых подходов в создании искусственных сред, где условия стабильности сохраняются при температурах до нескольких тысяч Кельвин и давлениях в тысячи атмосфер. Интерес к таким материалам, которые находятся в этих экстремальных условиях, необычайно возрос. Здесь возникают новые подходы в изучении наноматериалов, которые интересны своими необычными свойствами, существенно отличающимися от свойств вещества в макроскопическом состоянии.

В диссертационной работе Воронцова Александра Геннадьевича как раз исследуется эта актуальная тема, которая рассматривает текущие фазы систем с ненаправленным, ненасыщаемым взаимодействием (простые системы). К ним относятся в частности расплавы металлов. Интересна постановка задачи, где предметом исследования являются процессы образования структуры конденсированной фазы у простых систем при уплотнении их пара. При формировании структуры рассматриваются два механизма: гомогенный и гетерогенный. Первый путь изучает термодинамику перехода газ-флюид-жидкость, второй позволяет проследить процесс кластерообразования. Как раз здесь применима технология получения металлических нанопорошков из газовой фазы. Конечно, теоретическое описание структурных изменений при переходе металл-неметалл пока не завершено и ждёт дополнительных данных, которые могут существенно изменить и приблизить решение задачи. Работа Воронцова А.Г. развивает представления о неупорядоченных системах и о процессах структурообразования в них, что, несомненно, актуально и своевременно.

Научная новизна и практическая значимость работы, прежде всего, проявляется в уникальных результатах. Впервые определена связь геометрических параметров кластеров металла со степенью их нагрева. В работе утверждается, что структурные изменения расплавов металлов возникают в связи с особенностями на зависимости их свойств от термодинамических параметров. Качественное изменение свойств текучей фазы веществ (жидкость и сверхкритический флюид) показано на фазовой диаграмме, где установлена область перехода между плотными и рыхлыми состояниями. Предложен метод (в рамках статистической геометрии) анализа структуры текучих фаз (Ж-Ф-Г) с использованием анализа геометрии межатомного пространства. Очень полезным, на мой взгляд, оказались результаты моделирования процессов конденсации металлического пара. Эти результаты открывают путь новой технологии получения нано-порошков методом испарения – конденсации. Здесь мы получаем системный подход мультимасштабного моделирования физико-химических процессов в газодинамических средах с химическими превращениями. Понравилось в работе широта исследований. Автор не замыкается только на структурной геометрии и термодинамических процессах,

но идёт дальше. Разработаны алгоритмы и созданы программы для расчёта электронной структуры расплавов в широком диапазоне температур.

Для металлов это одна из важнейших характеристик, которая всегда используется для прогнозирования свойств в нестандартных и экстремальных условиях. Очень важная практическая составляющая диссертации.

Достоверность полученных результатов не вызывает сомнений, поскольку подтверждается воспроизводимостью характеристик исследуемых объектов, многократной проверкой результатов моделирования с имеющимися экспериментальными данными и литературными источниками, подтверждением результатов со справочными базами данных. Автор показал, исследуя атомную и электронную структуру металлов различной природы (щелочные металлы и ртуть), что в области плотной жидкости поведение системы является универсальным и соответствует модели свободных электронов. В рыхлом веществе проявляются индивидуальные физико-химические свойства элементов.

Это соответствует современным представлениям и подтверждает достоверность выводов автора.

Вместе с тем хотелось бы задать автору несколько вопросов по автореферату.

1. **На стр. 23** автореферата автор говорит о расчёте электронной структуры железа. При этом не упоминает особенности расчёта для этого элемента. Появляются вопросы: как находился muffin-tin потенциал? Как учитывались d-резонансы? Самосогласованные методы для суперячейки не проходят, но какова точность (ЛМТО) и метода рекурсии. Считаю, что 15%-точность для таких расчётов весьма приближенна, она показывает направление для уточнения, а не остановку на достигнутом.
2. **Не совсем понятна** из автореферата любовь автора именно к железу. Здесь масса нюансов, начиная от ферромагнетизма и заканчивая s-d гибридизацией. Если показывать возможности методов, которые применяются в расчётах, то тогда неплохо указать диапазон расчётов? Или это вся периодическая система Дмитрия Ивановича?
3. **На стр. 21** автореферата автор получает положение переходной области для Fe, Au, Ge экстраполяцией. Как она верифицирована?

Указанные замечания лишь показывают мой интерес к работе, которая выполнена на высоком теоретическом уровне. Она фундаментальна по стилю, по содержанию, по полученным результатам и выводам.

Полученные результаты могут быть использованы при модернизации технологических установок, работающих с жидкостями при экстремальных условиях. Материалы диссертации опубликованы в 21 печатной работе в журналах, рекомендованных перечнем ВАК РФ, а также в 51 научных работах изложены основные результаты. Диссертационная работа Воронцова А.Г. представляет собой научное достижение в области развития нового направления в физике конденсированного состояния, где изучается формирование электронно-энергетического спектра наноразмерных структур на основе жидких металлов, геометрическое формирование структуры веществ в процессе конденсации. Работа Воронцова Александра Геннадьевича «Структурообразование в простых металлических системах в жидкой фазе и при переходе пар-жидкость», соответствует специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния и требованиям ВАК, предъявляемым к докторским диссертациям.

Считаю, что Воронцов Александр Геннадьевич, несомненно, заслуживает присвоения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «физика конденсированного состояния».

Заведующий кафедрой информационных
систем и технологий Вологодского
государственного университета,
д.ф.-м.н., профессор

Вячеслав Алексеевич Горбунов

160000, г.Вологда, ул. Ленина, д.15

с.т. +7 9212345065

e-mail to: vagor@mh.vstu.edu.ru



ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ

Менеджер по персоналу
отдела кадров
Управления делами

Т.А. Худякова