

ОТЗЫВ

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

В диссертационной работе Воронцова А.Г. на нескольких конкретных примерах проведен комплекс исследований по изучению особенностей процессов структурообразования вблизи критических состояний жидкой фазы. Исследования базируются на геометрических вычислительных моделях, в основу которых положены хорошо известные симплексные структуры Делоне и структуры Вороного-Делоне, построенные на динамически изменяющихся множествах одиночных атомов вещества. Классификация отдельных структур жидкой фазы и некоторые особенности их физических свойств непосредственно связываются с преобладанием в объеме вещества того или иного типа определенных симплексов. Принималось во внимание также и поведение электронной структуры металлических расплавов вблизи кривой равновесия жидкость-пар. Работы этого направления в последнее время привлекают большое внимание исследователей и считаются достаточно перспективными. Поэтому, несомненно, тему диссертационной работы Воронцова А.Г. следует признать актуальной.

Автореферат дает достаточно полное и подробное описание поставленных в диссертации задач исследования, методов их решения, и анализа полученных экспериментальных и теоретических данных. Результаты исследований прошли широкое обсуждение на многочисленных конференциях специалистов и были достаточно полно опубликованы в научных изданиях, соответствующих данной специальности.

Отметим некоторые недостатки текста автореферата.

1. В автореферате большое внимание уделяется описанию геометрических методов моделирования фрагментов структуры изучаемых веществ, но отсутствуют обсуждение свойств используемых динамических моделей. В частности, встает вопрос о применимости метода молекулярной динамики к анализу динамических процессов и структуры веществ в окрестности критической области, в которой определяющую роль играют длинноволновые флуктуации структурных параметров среды, имеющие длины

волн и времена релаксации, значительно превышающие размеры расчетных ячеек и расчетных интервалов времени, используемых в указанном методе.

Осталась также не совсем ясной связь атомных динамических моделей с методами расчета электронной структуры расплавов, представленными на стр. 22, 23.

2. При анализе тепловых режимов кластеров (стр. 26-28) принимались во внимание только атомные столкновения с буферным газом. Это соответствует механизму атомарной теплопроводности с участием внешней среды. Однако из многочисленных задач об остывании макроскопических тел известно, что при высоких температурах преобладающую роль может играть механизм теплопередачи излучением, при котором уходящий тепловой поток пропорционален четвертой степени абсолютной температуры. Для микроскопических кластеров эта зависимость может стать иной, но от этого не менее значимой. К сожалению, в тексте автореферата эта проблема не обсуждается.

Разумеется, отмеченные недостатки текста автореферата существенно не сказываются на высокой научной значимости и практической ценности проведенных в диссертации исследований. Результаты работы достоверны, поскольку они получены корректными физико-математическими методами на основе твердо установленных экспериментальных данных.

Считаю, что диссертация Воронцова А.Г. удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК к докторским диссертациям, а ее автор, несомненно, заслуживает присвоения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Доктор физ.-мат. наук, доцент,
ведущий науч. сотрудник ФТИ УрО РАН,
Россия, 426000, г. Ижевск, Кирова 132,
тел.: (3412)375328, VasilyevLS@yandex.ru


Васильев Л.С.

Ученый секретарь ФТИ УрО РАН
кандидат химических наук

подпись заверяю


Гончаров О.Ю.

