

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию ВОРОНЦОВА Александра Геннадьевича «Структурообразование в простых металлических системах в жидкой фазе и при переходе пар - жидкость», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01-04-07 – физика конденсированного состояния.

Актуальность темы. Проблема установления структуры и ее пространственно-временной эволюции простых жидкометаллических систем, а также - ее влияния на их физические свойства имеет длительную историю и на сегодняшний день не решена полностью. Это в первую очередь связано с тем, что жидкометаллические системы не обладают дальним порядком, имеют сильный топологический беспорядок. Максимум, что можно сказать о жидкостях вообще и расплавах металлов, в частности, это, что они обладают ближним порядком с симметрией, существенно отличающейся от симметрии кристаллов. В настоящее время для изучения структуры жидкости и ее генетической связи со структурой кристалла, расплавом которого она является, широко используется компьютерный эксперимент в рамках молекулярной динамики в сочетании с различными методами расчета электронной структуры расплава. Основной проблемой применения метода молекулярной динамики к расчету структуры неупорядоченных систем является расчет потенциала межатомного взаимодействия, который в свою очередь определяется энергетическим спектром выделенного атома и его ближайшего окружения. Необходимость описания свойств жидкометаллических систем во всей области фазовой диаграммы "жидкость - газ" требует также исследования процессов конденсации металлического пара и структурообразования кластеров. В обоснование этого можно привести то, что с одной стороны $P - V$ диаграммы состояние жидкости можно представить как слабый раствор пузырей в жидкости, а с другой - как слабый раствор кластеров в жидкости. В критической и закритической области структура флюида определяется гетерофазными флуктуациями. Диссертация Воронцова А. Г. в конечном итоге посвящена поиску ответов на эти вопросы, необходимость ответа на которые вызвана прежде всего широким использованием жидкометаллических систем в качестве теплоносителей в атомных реакторах, в различных технологических процессах, а также созданием на основе жидкометаллических систем новых аморфных материалов (металлических стекол) с уникальными свойствами. Выше сказанное подтверждает соответствие диссертации Воронцова А. Г. специальности 01-04-07 – физика конденсированного состояния. Фундаментальный характер задач, явившихся мотивацией исследований диссертанта, позволяет утверждать об актуальности темы подготовленной им к защите научно-квалификационной работы.

Научная новизна и степень обоснованности выводов. Задачи, которые решались Воронцовым А. Г., имеют комплексный характер, но есть объединяющее их начало, в достаточной степени выраженное в названии диссертационной работы. В основе выполненных диссертантом исследований лежит обладающий научной новизной подход к анализу геометрической и топологической структуры жидкого металла, основанный на построении атомных и межатомных (симплициальных) сфер методом Вороного - Делоне. Диссертантом установлено, что локальная топология структуры жидкости однозначно описывается числом пересечения симплициальных сфер между собой. Диссертантом выделено пять базовых элементов структуры (симплексов Делоне n_0, n_1, n_2, n_3, n_4), линейная комбинация которых однозначно описывает локальную структуру жидкометаллических систем.

Ознакомление с диссертацией позволяет утверждать, что сформулированные Воронцовым А. Г. положения, выносимые на защиту, раскрыты и обоснованы в 4-х из 5 глав диссертации. Ниже, по ходу анализа их основного содержания, мы выделяем наиболее значимые на наш взгляд результаты диссертанта.

Первая глава - обзорная. В ней диссертант анализирует имеющиеся на сегодняшний день представления о структуре жидкого состояния вещества, экспериментальные и теоретические данные, обсуждает возможность фазовых переходов и структурных изменений в жидкости, а также - физические процессы, происходящие при конденсации паров металла и формировании атомной структуры кластеров. В заключении главы диссертант формулирует цель и задачи диссертационной работы. Цель работы, по его мнению, "состоит в установлении с помощью компьютерных экспериментов закономерностей изменения структуры атомных комплексов (кластеров), возникающих из пара, а также объемной структуры металлических систем вследствие изменения термодинамических параметров во всей области существования однофазного текучего состояния Жидкость - Флюид - Газ (Ж - Ф - Г)".

Вторая глава носит обзорно-оригинальный характер. В параграфе 2.1, носящем, в основном, обзорный характер обсуждаются особенности моделирования неупорядоченного состояния: использования экспериментальной информации об их структурных факторах и парных корреляционных данных для построения моделей локальной структуры жидкости; метода молекулярной динамики; выбора потенциалов взаимодействия; особенностей моделирования жидкостей (формулировки граничных и начальных условий, обеспечения условий выполнения условий равновесной термодинамики и расчета транспортных свойств). В разделах 2.2.1 и 2.2.2 на основе анализа существующих методов анализа структуры (глобальной и локальной) жидкости делается выбор в пользу анализа ее локальной структуры на основе метода Вороного - Делоне. При этом диссертантом предлагается обобщение данного метода, заключающееся в построении симплексов Делоне по методу пустого шара. Согласно этому методу одному симплексу отвечают 4 атома в центре 4-х атомных сфер, для которых существует одна симплициальная сфера (полость), касающаяся их, но не пересекающаяся с другими атомными сферами. Обосновано, что число пересечений симплициальных сфер не может быть больше 4-х. На примере анализа структурных факторов симплициальных полостей рублидия и цезия однозначно показывается, что геометрия межатомного пространства является альтернативным способом анализа геометрической атомной структуры неупорядоченных веществ. Предложенный диссертантом подход выделяет 5 базовых типов симплексов n_i ($i=0, 1, 2, 3, 4$ - число пересечений симплициальных сфер). Альтернативным взглядом, выделяющим топологию анализируемых структур, на предложенный диссертантом метод анализа является рассмотрение графа симплициальных сфер, вершинами которого являются их центры (вершины многогранника Вороного). Две вершины графа соединены, если их симплициальные полости пересекаются. Фактически граф симплициальных полостей представляет собой фрагмент разбиения занятого жидкостью пространства на многогранники Вороного, в котором учитываются только ребра, целиком лежащие внутри симплициальных полостей. При этом анализ структуры сводится к нахождению доли узлов, из которых выходит 0, 1, 2, 3 или 4 ребра. В связи со сказанным, можно полностью согласиться с утверждением диссертанта, что "простое топологическое строение графа симплициальных полостей и его физический смысл, как связной области межатомного пространства, позволяет по новому решать задачу описания структуры неупорядоченных веществ". Симплексы типов n_0, n_1, n_2 - элементы плотных структур (симплекс типа 0 соответствует правильному тетраэдру, типа 1 - слегка искаженному тетраэдру; 4 попарно смежных симплекса типа 2, симплициальные сферы которых практически совпадают, образуют, как известно, октаэдрические поры в ГЦК и ГПУ решетках). Симплексы типов n_3 и n_4 - элементы "рыхлых" структур (в симплексе типа 3 атом отделен от соседних атомов слоем симплициальных сфер, а симплекс типа 4 принадлежит структуре, в которой атомы расположены либо по одному, либо парами, пространство между которыми имеет достаточный для их свободного перемещения объем (свободный объем). Очень интересные результаты представлены в таблице 2.2, где приведена доля базовых элементов структуры, соответствующая максимальным значениям упаковки системы твердых сфер в ГЦК, ГПУ, ОЦК, ПК решетках, решетке типа алмаза, жидкости и идеального газа, и на рис. 2.12, показывающим зависимость доли базовых структур от упаковки твердых сфер. Данный рисунок показывает, что при числах упаковки, больших $f=0.5$ существует две ветви, соответствующие ГЦК и случайной структуре твердых сфер. При $f=0.49$ происходит разрушение (плавление) ГЦК решетки и остается одна ветвь решения, соответствующая случайной упаковке твердых сфер. Удивительно, что доля симплексов типа 4 ($\alpha_4 = 0.96$) в структуре алмаза оказалось в 1.6 раза больше, чем в идеальном газе твердых сфер

($\alpha_4 = 0.6$). Проведена оценка воспроизводимости результатов и их статистической достоверности для моделей атомных структур с различным числом атомов с потенциалом взаимодействия Леннарда-Джонса. Установлено, что для получения значений параметров симплексов Делоне с 5% точностью достаточно подсистемы, состоящей из 1000 - 2000 атомов, что существенно меньше требуемого числа атомов для определения параметров многогранников Вороного. Проведено сравнение с другими методами анализа разбиения Делоне, Показаны преимущества предложенного метода, заключающиеся в отсутствии эмпирических коэффициентов; разделении метрической и топологической составляющих структуры (метрические свойства модели определяются радиусами атомных сфер, а топологические - типом базовых симплексов); малым количеством параметров (всего 5), определяющим структуру близкого порядка неупорядоченных систем; высокой статистической надежностью и сохранением своей информативности для атомных систем любой плотности. Выше проанализированные результаты обладают несомненно научной новизной, достоверностью и могут быть использованы в качестве нулевого приближения при исследовании структур произвольных жидких систем.

В параграфе 2.3 рассмотрены особенности атомистического моделирования конденсации пара методами неравновесной молекулярной динамики. Моделирование проводилось в пакете программ LAMMPS. Рассмотрен начальный процесс конденсации пересыщенного пара меди в буферном инертном газе (аргоне). Выбраны начальные условия, потенциалы взаимодействия атомов (взаимодействие Cu-Cu описывалось потенциалом погруженного атома, учитывающим многочастичные взаимодействия [M. Daw, 1989], а взаимодействия Cu-Ag и Ag-Ag - потенциалом Леннарда-Джонса), температурные условия, обсуждены условия поддержания постоянства давления металлического пара. В результате проведения моделирования показана применимость классической теории нуклеации Фольмера - Френкеля - Зельдовича для описания механизмов зарождения и роста кластеров "при надлежащем определении ее параметров, описывающих вероятности роста отдельных кластеров при столкновениях".

Глава 3 посвящена анализу атомной структуры простых жидкостей в области низких плотностей. Используются три типа моделей жидкостей: модель твердых шаров; модель атомов с парным потенциалом Леннарда - Джонса; модель атомов с эффективным потенциалом взаимодействия, зависящим от термодинамического состояния системы атомов, или модель атомов с многочастичным потенциалом взаимодействия типа потенциала погруженного атома. Параграф 3.1, посвященный рассмотрению системы твердых сфер в области малых упаковок, носит обзорно-оригинальный характер: в подпараграфах 3.1.1 и 3.1.2 рассматривается описание термодинамики системы твердых сфер и геометрии их структуры в рамках известных аналитических теорий. В подпараграфе 3.1.3, носящим оригинальный характер, проведен с помощью полученных в главе 2 результатов моделирования, аккумулированных на рис. 2.12) проведен анализ зависимостей сжимаемости Z и конфигурационной энтропии от упаковки системы твердых сфер. Установлен непрерывный (без особенностей) рост модуля конфигурационной энтропии с ростом упаковки. Также установлен 21% скачок сжимаемости при $f = 0.49$, при которой в системе твердых сфер происходит плавления. В этом же подпараграфе суммируются известные из литературы особенности геометрической структуры системы твердых шаров. В подпараграфе 3.1.4 на основе рис. 2.12 обсуждается геометрия структур, соответствующим различным упаковкам твердых сфер. В подпараграфе 3.1.5 обсуждается поведение динамической атомной структуры, определяемой поведением автокорреляционной функции скорости в зависимости от упаковки системы твердых шаров. Диссертантом установлено, что свойства флюидного состояния системы твердых шаров различны при малых и больших упаковках системы. Граница, разделяющая области с различными свойствами флюидов, соответствует, согласно результатам моделирования, плотности упаковки $f = 0.3 \pm 0.5$. При данной плотности происходит, во-1-х, формирование бесконечного кластера симплициальных сфер ("перколяция свободного объема" по терминологии диссертанта); во-2-х, изменяется характер движения атомов: при плотностях, меньших $f = 0.3$ для нахождения транспортных коэффициентов системы твердых сфер применима теория Чепмена - Энскога, при больших - нет; в 3-х, изменяется соотношение между плотными и рыхлыми базовыми элементами в структуре твердых шаров: при меньших плотностях преобладают симплексы, характерные для рыхлых структур, а при больших пороговой упаковки - симплексы, характерные для плотных структур. В параграфе 3.2 обсуждается поведение структуры системы атомов с потенциалом

Леннарда - Джонса. Анализируется динамическая и геометрическая структура Леннард-Джонсовских флюидов, обсуждается жидкоподобное и газоподобное состояние флюида, для границы между которыми, по мнению автора, характерны наблюдаемые в экспериментах с неметаллическими системами аномалии дисперсии звука. В параграфе 3.3 анализируется структура расплавов ряда металлов: Cs, Rb, Hg, Fe, Ga, Au. В табл. 3.2 приведены литературные источники экспериментальных данных об структурных факторах этих расплавов и источников, в которых на основе данных о структурных факторах предложены модели атомной структуры для указанного в таблице диапазона температур, использованных диссертантом для проведения моделирования и анализа на основе его результатов геометрической и динамической атомной структуры. Основной результат главы 3 заключается в выделении диссертантом 3-х областей, первая из которых - плотная текучая фаза, в которой основную роль играют отталкивательные взаимодействия атомных остовов. В этой области для описания простых жидкостей и флюидов применима модель твердых сфер и наблюдается аномальная дисперсия скорости звука. Вторая область - соответствует области рыхлой текучей фазы, в которой существенна роль гетерофазных флуктуаций и в которой отсутствуют аномалии в дисперсии скорости звука. Третья область текучей фазы - переходная область между первыми двумя. Основные результаты данной главы - новы, оригинальны и важны для построения теории жидкого состояния.

Глава 4 посвящена исследованию электронных свойств металлических расплавов при высоких температурах и их связи с особенностями изменения геометрической и динамической атомных структур. В качестве основного метода расчета электронной структуры используется метод линейных маффтин орбиталей, реализованный в программе the STUTTGART TB-LMTO-47, совместно с методом рекурсии. В параграфе 4.1 описывается метод линейных маффтин орбиталей, особенности его использования для расчета плотности электронных состояний неупорядоченных металлических систем, а также - метод расчета их электропроводности. Основа этого метода - формула Кубо - Гринвуда, являющаяся следствием теории линейного отклика. Определена плотность электронных состояний в жидком железе для двух температур, близких к температуре плавления при атмосферном давлении. Особое внимание диссертант при расчете электропроводности уделил методической стороне расчета - выбору оператора фильтрации, т.к. от его эффективности зависит трудоемкость нахождения собственных векторов гамильтониана вблизи уровня Ферми. Рассчитано электросопротивление железа и произведено его сравнение с экспериментальными результатами различных авторов. В параграфе 4.2 рассчитывается плотность электронных состояний и электропроводность цезия, обсуждается вклад локализации электронов в поведение электропроводности, производится оценка парамагнитной восприимчивости. Диссертантом показано, что рост удельной парамагнитной восприимчивости в Cs, установленный экспериментально У. Фрейлендом [W. Freyland, 1979], а также отклонение характера роста электросопротивления от линейного [П.И. Быстров, Д.Н. Каган, Э.Э. Шпильрайн, 1988] связано с переходом от промежуточной области II к области III с преобладанием в структуре цезия симплексов типа 3 и увеличением в этой области вероятности локализации электронов. В параграфе 4.3 исследована электронная структура жидкой ртути, рассчитаны методами ЛМТО-суперячейки и ЛМТО-рекурсии плотность электронных состояний для различных значений температур, зависимость электропроводности от температуры и проведено сравнение с результатами экспериментов [И.И. Кикоин, А.П. Сенченков, 1967]. Установлено качественное и количественное согласие теоретических результатов автора, полученных с использованием плотности электронных состояний, рассчитанных методом ЛМТО-суперячейки. Показано, что в отличие от цезия отклонение характера роста электросопротивления от линейного происходит в области II и связано с практически линейным характером уменьшения плотности электронных состояний с ростом температуры в этой области. Результаты данной главы обладают несомненной научной новизной и достоверностью, обоснованной сравнением результатов моделирования с экспериментом.

Глава 5 посвящена рассмотрению процессов структурообразования кластеров при конденсации пересыщенного пара меди в атмосфере аргона. Для этого использованы результаты моделирования процесса начального этапа конденсации, рассмотренного в параграфе 2.3. В параграфе 5.1 рассмотрено энергетическое состояние атомных комплексов и кластеров в процессе интенсивной конденсации, при этом рассматривались системы с постоянной начальной плотностью металлического газа 0.39 г/м^3 и

различной скоростью охлаждения. Установлено, что в процессе роста кластеров внутренняя энергия теплового движения в кластере существенно превышает температуру буферного газа (термостата). Показано, что существует ее предельное значение для данного потенциала взаимодействия, не зависящее от условий охлаждения (при дополнительном условии добавления в систему атомов меди для компенсации их убыли в результате конденсации), равное 0.37 эВ/атом (ее значение близко к энергии плавления (около 0.2 эВ/атом) и существенно меньше энергии испарения (около 3 эВ/атом) объемного материала меди при атмосферном давлении). В параграфе 5.2 обсуждается с использованием симплексов Делоне структура образовавшихся в результате конденсации кластеров с различным числом атомов: $N = 3200$, 290 и 21, а также проведено сравнение структуры кластеров со структурой объемной меди. Установлено, что кластеры с $N = 3200$ состоят из трех областей: ядра ($R_c < 1.7$ нм), переходного слоя толщиной 0.3-0.4 нм и газоподобной оболочки. Переходной слой обладает повышенной концентрацией правильных тетраэдрических элементов (симплексов типа 0 и 1) и пониженной концентрацией симплексов типа 3 и 4. Сравнение структур с различной внутренней энергией показывает, что его структура в кластере с большей внутренней тепловой энергией приближается к структуре ядра, при этом толщина примерно на 15% увеличивается по сравнению с менее "нагретым" кластером. Кластер с $N = 290$ атомов также состоит из трех аналогичных областей. При этом ядро и переходной слой кластера из 290 атомов имеют большую долю симплексов типа 0 и 1 по сравнению с их долей в кластере из 3200 атомов, что, по мнению диссертанта, связано с переходом от ГЦК упорядочения в больших кластерах к икосаэдрическому упорядочению в кластерах с малым числом атомов. Показано, что в кластере с $N = 21$ ядро практически отсутствует. При этом уплотненный слой сохраняет размер 0.2 нм, а его структура содержит большую долю симплексов типа 0, 1, 2, что характерно для икосаэдрических структур, содержащих большое количество правильных тетраэдров. Проведено сравнение структуры кластеров со структурой объемной меди. Установлено, что структура ядра кластера близка к структуре объемной меди при той же температуре для радиусов более 5 средних межатомных состояний (более 3000 атомов). Результаты главы 5 имеют несомненную научную новизну и важны для построения теории неупорядоченного конденсированного состояния вещества.

Отметим, что изложение материала в каждой главе диссертации завершается достаточно четко сформулированными выводами

Автореферат включает необходимые сведения о диссертации Воронцова А. Г. и соответствует её содержанию. Сама диссертационная работа структурирована по правилам ВАК, содержит требуемые формальные разделы, в достаточной степени иллюстрирована и дает полное представление о проведенных исследованиях и их результатах. Достоверность результатов компьютерных экспериментов обоснована экспериментальной информацией о структурных факторах, исходной для выбора моделей атомной структуры, сравнением рассчитанных физических характеристик с известными из литературы экспериментальными данными. Следует отметить, что личный вклад автора диссертации в проделанную работу не вызывает сомнения.

Как это типично для любой серьезной научно-квалификационной работы, по диссертации Воронцова А. Г. можно сделать некоторые замечания.

1. Литературный обзор, сделанный в главе 1 достаточно полон, однако в нем отсутствуют ссылки, на принципиально важные, по моему мнению, для темы рецензируемой диссертации работы: например, монографии Дж. Займана "Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем" - М.: Мир, 1982, в которой обстоятельно рассмотрен весь комплекс проблем связанным с описанием неупорядоченных сред, в частности, жидких металлов; И.Р. Юхновского и З.А. Гурского "Квантово-статистическая теория неупорядоченных систем" - Киев: Наукова Думка, 1991, в которой предложен первопринципный метод расчета электронной структуры и электропроводности неупорядоченных металлических систем, в том числе, жидких металлов; В.Ф. Гантмахера "Электроны в неупорядоченных средах" - М.: Физматлит, 2003; А.С. Бакая "Поликластерные аморфные тела" - М.: Энергоатомиздат, 1987, в которой предложены поликластерная модель аморфных тел и способ описания ближнего некристаллического порядка на основе рассмотрения координационных многогранников вместо многогранников Вороного; В.П.

Скрипова. Метастабильная жидкость. - М.: Наука, 1972 и В.П. Скрипова, В.П. Коверды. Спонтанная кристаллизация переохлажденных жидкостей. Зарождение кристаллов в жидкостях и аморфных твердых телах. - М.: Наука, 1984, в которых рассмотрены вопросы нуклеации и роли метастабильности жидкостей в динамике фазовых переходов; Н.П. Коваленко, Ю.П. Красного, С.А. Тригера. Статистическая теория жидких металлов. - М.: Наука, 1990, в которой рассмотрена статистическая теория жидких металлов и их электрофизических свойств в том числе и в закритической области.

2. На стр. 68 главы 1 в параграфе, посвященному анализу электронных свойств, впервые появляется упоминание о формуле Займана, при этом она не приводится, отсутствует также ссылка на соответствующую работу. Данную формулу (да и другие упоминаемые в диссертации известные формулы) необходимо было привести, потому что читатели диссертации не обязаны помнить их наизусть. **Историческая справка:** формулу Займана следовало бы называть формулой Френкеля - Займана, потому что еще в 1924 г. Я.И. Френкель воспользовавшись аналогией между рассеянием рентгеновского излучения на флуктуациях плотности и электронов (так называемой дифракционной моделью металла) объяснил температурную зависимость проводимости металлов (его объяснение не требует кристаллической упорядоченности) [Я.И. Френкель. УФН, 1928. Т. 8. Вып. 2. С. 155-193; Волновая механика. Т.1. - М.-Л.: ОНТИ-ГТТИ, 1934. Параграф 34; Введение в теорию металлов. / Изд. 4 под ред. С.В. Вонсовского - Л.: Наука, 1972 - Гл. 5 и послесловие С.В. Вонсовского.].

3. В выводах к главе 1 диссертантом "выдана" следующая сентенция: "Вопреки существовавшему несколько десятилетий назад мнению, сейчас известно, что жидкости претерпевают существенные изменения структуры при нагреве". Это у кого же диссертант нашел такие мнения? Достаточно посмотреть, хотя бы книгу Я.И. Френкеля "Кинетическая теория жидкостей", написанную во время Второй мировой войны, чтобы понять абсурдность данной сентенции.

4. Во вводных к основному тексту главы 2 абзацах обсуждается концепция многомасштабного моделирования, хотя в дальнейших главах многомасштабное моделирование не проводится, да и цель диссертационной работы совершенно иная: исследование атомной структуры жидкости в области непрерывного перехода Ж-Ф-Г. Рис. 2.1 на с. 88 напечатан вверх ногами.

5. Как уже отмечено, очень интересны результаты, представленные в табл. 2.2 и на рис. 2.12, показывающем зависимость доли симплексов i -го типа от плотности упаковки твердых сфер. По моему мнению, следовало бы в табл. 2.2 указать доли симплексов i -го типа при $f = 0.49$, где происходит плавление в системе твердых сфер, а также добавить к рис. 2.2 анализ суммарного структурного фактора (парной корреляционной функции) и вклада отдельных структурных факторов (например, структурных факторов симплициальных полостей каждой из базовых структур) в итоговую структуру системы твердых шаров хотя бы для выделенных значений упаковки (например, при $f = 0.49$).

6. Почему особенности атомистического моделирования конденсации рассмотрены во 2-й главе, а не в главе 5, где результаты этого моделирования используются при анализе структуры кластеров, образованных в результате конденсации из газовой фазы? Там рассмотрение этих особенностей соответствовало бы логике работы с точки зрения рассмотрения структуры атомных комплексов и кластеров и ее влияние на свойства жидкости на фазовой диаграмме "жидкость-газ" со стороны газа.

7. Почему параграф 2.2.1 "Динамическая атомная структура" не совмещен с параграфом 3.1.5 "Динамическая атомная структура"? И там и там рассматривается система твердых шаров, а в параграфе 3.1.5 при анализе делается отсылка к рис. 2.5.

8. В главе 3 и 4 фазовая диаграмма строится в координатах $T - \rho$, когда вместо изотерм используются изобары. Поэтому на диаграммах рис. 3. 18, 3.24 и 3.27 точкам бинодали, в которых производится моделирование, должны быть указаны соответствующие значения давления.

9. В таблице 3.2, где указаны литературные источники, исходные для проведения моделирования указан диапазон температур, но не указаны диапазон давлений и плотностей.

10. На с. 231 диссертации написано: "Плотность электронных состояний вычислялась непосредственным интегрированием по зоне Бриллюэна". О каких зонах Бриллюэна можно говорить в случае жидких металлов = топологически неупорядоченных сред?

11. В конце с. 236 написано: "Можно отметить хорошее согласие данных для параметризованного гамильтониана (рис. 4.5) и самосогласованного гамильтониана (рис. 4.3). Точно передаются ширина зон и их форма" С утверждением по поводу ширины можно согласиться, однако с выводом о форме - нет. Простое совмещение кривых с этих рисунков на одном рисунке, показывает что форма кривых вблизи их максимума сильно отличается.

12. На с. 263-264 написано: "Для Hg моделирование подтвердило происходящее с ростом температуры разделение s- и p-зон плотности состояний, между которыми располагается уровень Ферми". О каких зонах можно говорить для неупорядоченной среды малой плотности? Об уровне Ферми - можно, о зонах - нет. Максимум о чем можно говорить, так это об s- и p- атомных орбиталях, образовании в спектре электронов (псевдо)щели, в которую попадает уровень Ферми. Можно ожидать при этом, что плотность электронов n_e пропорциональна $\exp(-\varepsilon_a/(kT))$, где ε_a - энергия активации (порядка потенциала ионизации с учетом его понижения давлением), определяющая вероятность перехода электрона от данного атома к одному из ближайших соседей.

13. При рассмотрении структурообразования кластеров и рассмотрении их энергетического состояния в диссертации вообще не упоминается колебательный спектр атомов кластеров, не обсуждается влияние величины энергии колебаний и их амплитуды на устойчивость кластеров и их структуру. Насколько оправданно отсутствие рассмотрения одной из фундаментальных физических характеристик - колебательного спектра, поскольку уже двухатомная молекула имеет наряду с поступательными и вращательными колебательные степени свободы?

Также замечены следующие опечатки. На с. 96 после "уравнений Ньютона" вместо 2.5 должно быть (2.5)-(2.6); на с. 118 вместо "Зейц" следует писать "Зейтц"; в ф. (4.2) допущены 2 опечатки: ее правильный вид $S^\alpha = \alpha^{-1}[(1 - \alpha S^0)^{-1} - 1] = \alpha^{-1}(1 - \alpha S^0)^{-1} - \alpha^{-1}$; на с. 234 вместо "... разряженную..." должно быть "...разреженную..."

Можно отметить еще некоторые «небрежности» работы. Ссылка [83] повторяет ссылку [52]; ссылка [246] - неправильно указаны страницы публикации; [265] - неправильные фамилии двух из трех авторов монографии: должно быть Лифшиц, а не Лившиц; Пастур, а не Пастурб; [270] - первоисточник не перевод на английский, а русскоязычная статья в ЖЭТФ. 2013. Т. 142. Вып. 5(11). С. 887-907 (как известно, приоритет устанавливается по первой публикации).

Отмеченные замечания не снижают общего положительного впечатления о работе Воронцова А. Г. Я полагаю, что ответы на заданные вопросы не составят для него проблемы и дадут специализированному совету Д 212.298.04 дополнительные основания для позитивной оценки диссертационной работы. Здесь уместно заметить, что представленные материалы исследований имеют достаточно хороший уровень верификации и апробации. Труды Воронцова А. Г. представлены в виде монографии, написанной в соавторстве, статей в рецензируемых научных журналах, трудах конференций и других изданиях (45 публикации), из них 8 включены в базу WEB of Science и 12 - в базу Scopus. Не вызывает сомнения, что полученные Воронцовым А. Г. результаты будут востребованы научным сообществом для дальнейших применений в национальных и мировых исследовательских центрах.

Общее заключение. Таким образом, Воронцов Александр Геннадьевич представил к защите законченную научно-исследовательскую квалификационную работу, систематизирующую приоритетные и оригинальные результаты цикла работ по решению актуальных научных задач большой значимости по развиваемому научному направлению. На основании изложенного можно заключить, что диссертационная работа «Структурообразование в простых металлических системах в жидкой фазе и при переходе пар - жидкость» удовлетворяет требованиям к докторским диссертациям, установленным в п. 9 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842. Её автор, Воронцов Александр Геннадьевич, несомненно, заслуживает присвоения искомой ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01-04-07 – физика конденсированного состояния за решение важной фундаментальной научной проблемы – исследование структурообразования в простых металлических системах в жидкой фазе и при переходе пар-жидкость и установление существенной

роли геометрии и топологии локального некристаллического порядка в определении физических свойств простых жидкометаллических систем..

Заведующий лабораторией нелинейной динамики
Института электрофизики УрО РАН,
доктор физико-математических наук,

Н.Б. Волков

Подпись д.ф.-м.н. Волкова Николая Борисовича заверяю

Ученый секретарь Института электрофизики УрО РАН,
кандидат физико-математических наук



Е.Е. Кокорина

Волков Николай Борисович

620016 г. Екатеринбург, ул. Амундсена д.106

Институт электрофизики УрО РАН

Тел. +7-343-267-86-60

e-mail: nbv@iep.uran.ru