

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 003.051.01
на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института неорганической химии им. А.В. Николаева
Сибирского отделения Российской академии наук, ФАНО
ПО ДИССЕРТАЦИИ **Геца Кирилла Викторовича**
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
КАНДИДАТА ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК

аттестационное дело № _____
дата защиты 27 мая 2015 г. Протокол № 8

О присуждении *Гецу Кириллу Викторовичу*, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация *«Коллективные свойства низкочастотных колебаний в аморфных льдах низкой, высокой и сверхвысокой плотности»* в виде рукописи по специальности 02.00.04 – физическая химия (физико-математические науки) принята к защите 25 марта 2015 г., протокол № 6, диссертационным советом Д 003.051.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук (ИНХ СО РАН) (630090, г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, д. 3, действующего на основании приказа Минобрнауки РФ от 11.04.2012г. № 105/нк).

Соискатель *Гец Кирилл Викторович*, гражданин России, на момент защиты диссертации работает в лаборатории физической химии конденсированных сред ФГБУН Института неорганической химии им. А.В. Николаева СО РАН в должности инженера 1 категории. В период подготовки диссертации с июля 2010 г. по июль 2013 г. обучался в очной аспирантуре ИНХ СО РАН. В 2010 году соискатель окончил Новосибирский государственный университет по специальности – физика.

Диссертация выполнена в лаборатории физической химии конденсированных сред Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института неорганической химии им. А.В. Николаева Сибирского отделения Российской академии наук.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор *Белослудов Владимир Романович* работает в лаборатории физической химии конденсированных сред ИНХ СО РАН в должности главного научного сотрудника.

Официальные оппоненты:

1. *Наберухин Юрий Исаевич*, гражданин России, доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатория молекулярной динамики и структуры Федерального государственного бюджетного учреждения науки

Института химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск.

2. *Суровцев Николай Владимирович*, гражданин России, доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией спектроскопии конденсированных сред Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института автоматики и электрометрии Сибирского отделения Российской академии наук, г. Новосибирск – дали **положительные отзывы** о диссертации.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук (ИТПМ СО РАН) дала **положительное заключение**. Заключение составлено старшим научным сотрудником лаборатории «Физики быстропротекающих процессов» ИТПМ СО РАН к.ф.-м.н. И.Ф. Головнёвым и утверждено ВРИО директора Института чл.-к. РАН А.Н. Шиплюком. В заключении указано, что работа «...представляет собой законченное научное исследование на актуальную тему, в которой получены оригинальные результаты. Работа полностью удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук...». Диссертационная работа обсуждена на семинаре «Теоретической и прикладной механики» ИТПМ СО РАН 13 марта 2015 года, протокол № 2.

По теме диссертации соискатель имеет 4 опубликованных статьи в российских и международных журналах. Общий объём опубликованных работ составляет 29 стр.(1,8 печ.л.). 14 работ опубликованы в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Гец К.В., Субботин О.С., Белослудов В.Р. Теоретическое исследование динамических свойств аморфных льдов низкой, высокой и сверхвысокой плотности // Теплофизика и аэромеханика. – 2009. – Т. 16. – Спецвыпуск. – С. 771-776.
2. Gets K.V., Subbotin O.S., Belosludov V.R. Peculiarities of Vibration Characteristics of Amorphous Ices // International Journal of Computational Materials Science and Engineering. – 2012. – V. 01. N. 01. – P. 1250008-9.
3. Гец К.В., Белослудов В.Р. Теоретическое исследование свойств низкочастотных колебаний аморфных льдов низкой, высокой и сверхвысокой плотностей // Журн. структур. химии. – 2014. – Т. 55, № 6. – С. 1073-1079.

На автореферат диссертации поступило 10 отзывов. Все отзывы положительные, 8 – с замечаниями. Отзывы поступили: от заслуженного деятеля

науки РФ, д.ф.-м.н., профессора **С.Г. Овчинникова**, заместителя директора ФГБУН Института физики СО РАН по научной работе, г. Красноярск; от д.ф.-м.н., доцента **Ю.Г. Пейсаховича**, профессора кафедры общей физики Новосибирского государственного технического университета; от к.ф.-м.н. **А.С. Трифонова**, старшего научного сотрудника Научно-исследовательского института ядерной физики Московского государственного университета; от д.ф.-м.н. **Н.Н. Медведева**, заведующего лабораторией молекулярной динамики и структуры ФГБУН Института химической кинетики и горения СО РАН; от д.ф.-м.н., профессора **Е.Н. Бродской**, ведущего научного сотрудника Института химии Санкт-Петербургского государственного университета; от д.ф.-м.н., профессора **Л.А. Боярского**, профессора кафедры физических методов изучения твердого тела физического факультета ФГОУ ВПО Новосибирского государственного университета; от д.ф.-м.н., профессора **В.К. Малиновского**, главного научного сотрудника ФГБУН Института автоматики или электрометрии СО РАН; от д.х.н., профессора **В.А. Истомина** и к.ф.-м.н. **С.И. Долгаева**, главного и ведущего научных сотрудников «Газпром ВНИИГАЗ»; от к.ф.-м.н. **Т.М. Инербаева**, приглашенного профессора Физико-технического факультета Евразийского национального университета; от д.ф.-м.н., профессора **С.Е. Кульковой**, главного научного сотрудника ФГБУН Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук.

Замечания к автореферату к выводам диссертации и положениям, выносимым на защиту, отсутствуют. Все отзывы заканчиваются выводом, что диссертационная работа К.В. Геца полностью соответствует требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям ВАК, а ее автор К.В. Гец заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается компетентностью оппонентов в области физической химии, в особенности в области компьютерного моделирования в теоретических работах и в области физики конденсированного состояния в экспериментальных работах, что подтверждается наличием публикаций оппонентов и ведущей организации в данной области исследований.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

построена модель для расчета структурных и динамических свойств аморфных льдов низкой, высокой и сверхвысокой плотности;

разработано псевдокристаллическое приближение, описывающее модельные суперячейки аморфных льдов как элементарные ячейки псевдокристалла, для определения динамических свойств аморфных льдов низкой, высокой и сверхвысокой плотности вне центра зоны Бриллюэна;

получены и исследованы динамические свойства, которые выявили наличие коллективных колебаний в аморфных льдах низкой, высокой и сверхвысокой плотности. Рассчитаны дисперсионные кривые коллективных колебаний аморфных льдов;

впервые показано существование колебаний, подобных оптическим колебаниям в кристаллах. Эти колебания дают основной вклад в бозонный пик аморфных льдов;

описана природа экспериментально наблюдаемого фазового перехода первого рода между аморфными льдами низкой и высокой плотности на основе теоретических расчетов структурные и динамические свойств аморфных льдов;

показана возможность существования низкочастотного акусто-оптического резонанса в аморфном льде высокой плотности и описаны его свойства.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

разработана модель для определения структурных и динамических свойств аморфных льдов низкой, высокой и сверхвысокой плотности, которая позволяет исследовать колебательные свойства как в центре, так и вне центра зоны Бриллюэна, для чего было использовано приближение псевдокристалла;

показано, что построенная статистико-термодинамическая модель может быть использована для описания коллективных колебаний и природы фазового перехода первого рода между аморфными льдами низкой и высокой плотности;

получены данные о низкочастотных коллективных колебаниях, позволяющие описать природу бозонного пика в аморфных льдах низкой, высокой и сверхвысокой плотности.

определена область частот, в которой может находиться акусто-оптический резонанс в аморфном льде высокой плотности;

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

предложенные молекулярные модели дают возможность понять природу ранее обнаруженного фазового перехода первого рода между аморфными льдами низкой и высокой плотности, так как собственные колебания решетки дают значительный вклад в свободную энергию. Обнаруженный в работе низкочастотный акустооптический резонанс может являться причиной рассеяния фононов, что приводит к аномалии теплопроводности аморфных веществ. Показано, что избыточные низкочастотные колебания, дающие основной вклад в бозонный пик, являются коллективными колебаниями, подобными оптическим колебаниям в кристаллах. Это дает возможность понять природу бозонного пика. Результаты исследования аморфных льдов низкой, высокой и сверхвысокой плотности находятся в согласии с экспериментальными данными, а модель может быть использована и для других аморфных веществ, например, аморфных металлов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

исследование, проведенное в работе, базируется на использовании методов классической статистической термодинамики, на современных методах компьютерного моделирования и комплексе программного обеспечения, созданного сотрудниками лаборатории физической химии конденсированных сред ИХ СО РАН, а также на многолетнем опыте, накопленном этими сотрудниками. Результаты расчета функции радиального распределения кислород-кислород и плотности колебательных состояний исследуемых аморфных льдов низкой, высокой и сверхвысокой плотности, а также структурного фактора аморфного льда высокой плотности согласуются с экспериментальными данными.

Личный вклад соискателя состоит в том, что:

автором были построены статистико-термодинамические модели аморфных льдов низкой, высокой и сверхвысокой плотности, рассчитаны структурные и динамические свойства этих льдов, разработано приближение псевдокристалла и усовершенствованы теоретические методы расчета в области, касающейся изучения динамических свойств аморфных льдов вне центра первой зоны Бриллюэна псевдокристалла. Подготовка публикаций и докладов по теме диссертационной работы проводилась совместно с соавторами.

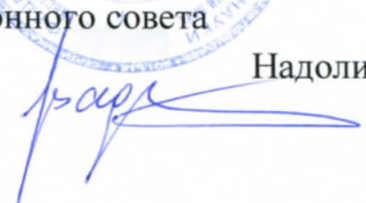
Диссертационный совет Д 003.051.01 на заседании 27 мая 2014 г., протокол №8 пришел к выводу о том, что диссертация соответствует п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней» от 24 сентября 2013 г. № 842, т.е. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой содержатся описания природы наблюдаемого в аморфных льдах бозонного пика и фазового перехода первого рода между аморфными фазами льда, и принял решение присудить *Гецу Кириллу Викторовичу* ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 25 (двадцати пяти) человек, из них 15 (пятнадцать) докторов наук по специальности 02.00.04 – физическая химия участвовавших в заседании и голосовании, из 33 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение учёной степени – 21 (двадцать один), против присуждения учёной степени – 2 (два), недействительных бюллетеней – 2 (два).

Председатель диссертационного совета
чл.-к. РАН


Федин Владимир Петрович

Ученый секретарь диссертационного совета
д.ф.-м.н.


Надолинный Владимир Акимович

27.05.2015г.