

УТВЕРЖДАЮ

Временно исполняющий
обязанности директора
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Института теоретической
и прикладной механики
им. С.А. Христиановича СО РАН
чл.-корр. РАН Шиплюк А.Н.

5 мая 2015 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ О ДИССЕРТАЦИИ

Гец К.В.

**КОЛЛЕКТИВНЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОЧАСТОТНЫХ КОЛЕБАНИЙ В
АМОРФНЫХ ЛЬДАХ НИЗКОЙ, ВЫСОКОЙ И СВЕРХВЫСОКОЙ
ПЛОТНОСТИ**

представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по
специальности 02.00.04 – физическая химия

Данная **работа посвящена** исследованию фазовых переходов и статистико-термодинамических свойств аморфных льдов низкой плотности (LDA), высокой плотности (HDA) и сверхвысокой плотности (VHDA). Построение динамической модели основано на методе решеточной динамики и на наиболее фундаментальной информации о системе – потенциале межмолекулярного взаимодействия. Выбор аморфных льдов обусловлен наличием широкого выбора таких потенциалов, описывающих взаимодействие молекул H_2O и большим количеством экспериментальных данных, позволяющих проводить верификацию используемых моделей.

В работе решается задача определения свойств и характеристик коллективных колебаний и их связь с природой фазовых переходов в аморфных льдах и природой бозонного пика.

Актуальность исследования аморфных льдов обусловлена неясностью природы наблюдаемых в аморфном веществе бозонного пика и фазового перехода первого рода LDA–HDA. Также невыясненной остается связь этих явлений с коллективными колебаниями в аморфных льдах. В



диссертационной работе актуальность обусловлена также возможностью применения созданных методик к исследованию как аморфных льдов LDA, HDA и VHDA, так и аморфных веществ с более сложным межмолекулярным взаимодействием.

Тема работы соответствует специальности 02.00.04 – физическая химия.

Диссертация состоит из введения, обзора литературы (гл. I), описания теоретической модели (гл. II), обсуждения результатов моделирования и их критического анализа (гл. III), выводов, заключения и списка литературы. Диссертация изложена на 111 страницах, содержит 28 рисунков, 3 таблицы и библиографию из 204 наименований.

Во **введении** обоснована актуальность темы, сформулирована научная новизна и практическая значимость работы, изложены цель и задачи исследования, приведены положения, выносимые на защиту.

Первая глава работы посвящена обзору литературы, в котором описаны подробности открытия аморфных льдов, переходы между аморфными и кристаллическими фазами льда. Рассмотрена молекулярная структура аморфных льдов и дан анализ работ по численному моделированию их свойств. Приведен подробный анализ работ, посвященных исследованию коллективных колебаний и бозонного пика в аморфном веществе. Дан обзор и критический анализ моделей взаимодействия молекул воды и методов моделирования структурных, динамических и термодинамических свойств веществ. Приведено обоснование выбора метода решеточной динамики.

Во **второй главе** подробно изложена суть этого метода, описана процедура оптимизации координат, построения суперячеек аморфных льдов. Особо следует отметить оригинальный прием используемый автором при построении псевдокристалла, для которого вводится обратная решетка, позволяющая проводить расчеты динамических свойств не только в центре зоны Бриллюэна, но и вне его не привлекая дополнительные вычислительные мощности. Глава завершается подробным описанием алгоритма расчета динамических свойств аморфных льдов.

В **третьей главе** приводятся основные результаты, дается их критический анализ, и делаются выводы. Проведено подробное исследование связи коллективных колебаний и фазового перехода первого рода между льдами LDA и HDA. Расчет коллективных колебаний вне центра первой зоны Бриллюэна позволил сделать заключение, что в аморфных льдах можно наблюдать аналогию с акустическими и оптическими колебаниями в кристаллах.

Расчет динамического структурного фактора аморфного льда HDA позволяет сделать автору важнейший вывод, что основной вклад в наблюдаемый низкочастотный пик дают кристаллоподобные оптические коллективные колебания.

Расчет плотности колебательных состояний аморфных льдов позволил доказать, что бозонный пик формируется за счет коллективных колебаний, подобных оптическим колебаниям в кристалле.

Необходимо подчеркнуть, что сильной стороной работы, которая проиллюстрирована в третьей главе, является многочисленное сравнение полученных результатов с экспериментальными данными, что подтверждает достоверность расчетов.

В **выводах** приведены основные результаты, выносимые на защиту, а в **заключение** проведен общий анализ работы и ее место в теории аморфных веществ.

Несмотря на значительность полученных результатов, к диссертации есть несколько замечаний.

В первую очередь о методических недостатках в тексте.

1. На стр. 6 «...при исследовании низкочастотных колебаний в ...аморфных материалах с ... ковалентными металлическими связями...». В то же время в классической литературе (см., например, Н. Ашкрофт, Н. Мермин Физика твердого тела. Т.2 Изд-во «Мир», М.: 1979. – 422 с.) этот вид связей строго разделяется.

2. На стр. 7 в третьем абзаце впервые встречается термин «коллективные колебания», для которого дается первое определение на стр.66 (второй абзац). В классической литературе (см., например, Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц Механика. Изд-во «Наука» – М.: 1965. – 204 с., Г. Голдстейн Классическая механика. Государственное изд-во технико-теоретической литературы. – М.: – 1957. – 408 с., Ф.Р. Гантмахер Лекции по аналитической механике. М.: "Физматлит". – 2001– 264 с.) этот термин не используется, что вызывает методические затруднения при первом ознакомлении с диссертацией.

3. Аналогичная проблема с употреблением терминов возникает на стр.8 в фразе «расчет дисперсионных кривых аморфных льдов...». Дисперсионные кривые строятся для широкого класса параметров. Здесь же наиболее уместно было бы писать "расчет дисперсии фононов в аморфных льдах".

4. На стр. 33 «Вклад кинетической энергии в свободную энергию.....». Необходимо «Вклад кинетической энергии хаотического движения атомов в свободную энергию.....».

5. На стр. 37 «колебательная неустойчивость структуры...» «механическая неустойчивость....» Понятие неустойчивости в физике и механике относится к фундаментальным проблемам и необходимо раскрывать сразу содержание терминов в работе.

6. На стр. 45 «...наиболее существенным недостатком метода молекулярной динамики является то, что при изучении колебательного спектра фактически производится усреднение по мгновенным положениям молекул». Эта фраза должна быть расшифрована, т.к. метод МД состоит в использовании классических уравнений движения для атомов на основе известных потенциалов межатомного взаимодействия, и определения координат и импульсов всех атомов в необходимые моменты времени.

7. При изложении метода решеточной динамики (п.2.2.) имеется ряд фраз, которые связаны между собой и требуют разъяснения. На стр. 52 «Из формулы для потенциальной и кинетической энергии следуют уравнения

движения молекул». На самом деле уравнения движения молекул являются фундаментальными и их вид определяется тем формализмом, который используется в работе: формализмом Ньютона (уравнения Лагранжа 2-го рода), формализмом Лагранжа (уравнения движения Лагранжа) или формализмом Гамильтона. Используемые уравнения движения в методе решеточной динамики (стр. 52) являются классическими. В связи с этим представляло бы интерес обозначить их связь с формализмами аналитической механики. Кроме того, необходимо расшифровать фразу на той же стр. 52 «Использование Фурье-преобразования уравнений движения является преимуществом метода решеточной динамики, т.к. позволяет работать с колебаниями при температуре, близкой к нулю Кельвина». Однако при таких низких температурах существенны квантовые эффекты и правильный подход должен быть основан на использовании уравнения Шредингера. А Фурье-преобразование используется широко во всей теории колебаний многочастичных систем.

Есть в диссертационной работе и отдельные недостатки в оформлении.

1. На стр. 40 не описаны отдельные обозначения в формуле, описывающей потенциал взаимодействия молекул. ($E_{ab} = ..$) То же самое на стр. 64 в формуле для доли молекул от общего числа, участвующих в колебаниях и имеющих высокую амплитуду.

2. На стр. 52 нумерация формул (1) и (2) не вынесена на отдельную строку. То же самое на стр. 53 для формулы (3).

3. На стр. 60 в подписи к рис.6 есть фраза «Красным линиям соответствуют...», в то время как весь рисунок выполнен черными линиями.

4. Затрудняет прочтение работы появление рисунков в тексте до первого упоминания о них: (рис. 7,8 на стр. 61, а описание на стр. 62; рис. 9 на стр. 62, а описание на стр. 63 и т.д.).

5. Есть путаница с обозначениями: на стр. 75 k – волновой вектор фононов $\omega(k)$; на стр. 51 k – номер молекулы в элементарной ячейке; на стр. 52 вводится частота колебаний $\omega(\vec{q})$ с волновым вектором $\vec{q}$.

Однако сделанные замечания не снижают уровня диссертационной работы.

Результаты хорошо апробированы: работа докладывалась на 15 конференциях, из которых 9 – международных. По материалам диссертационной работы 3 статьи в отечественных журналах, рекомендованных ВАК и 1 статья в международном журнале.

Автореферат хорошо оформлен и соответствует содержанию диссертации.

Диссертация К. В. Геца 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. Ее автор, Гец Кирилл Викторович, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук.

Отзыв ведущей организации на диссертацию Геца К. В. «Коллективные свойства низкочастотных колебаний в аморфных льдах низкой, высокой и сверхвысокой плотности» обсужден и одобрен на семинаре «Теоретической и прикладной механики» ФГБУН Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН (протокол №2 от 13 марта 2015 г.).

Старший научный сотрудник лаборатории
«Физики быстропротекающих процессов»

ФГБУН ИТПМ СО РАН

с.н.с., к.ф.-м.н.



И.Ф. Головнев

г.Новосибирск, ул. Институтская, д.4/1,

630090

Тел.+73833303804

e-mail: golovnev@itam.nsc.ru

Собственноручную подпись И.Ф. Головнев
удостоверяю Л.В. Ястребова
Зав. канцелярией Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Института теоретической и прикладной механики
им. С.А. Христиановича Сибирского отделения
Российской академии наук

05.05.2015

