

ОТЗЫВ

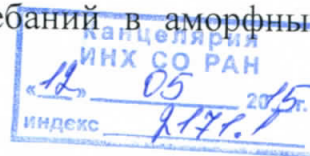
на автореферат диссертационной работы **Геца Кирилла Викторовича**
«Коллективные свойства низкочастотных колебаний в аморфных льдах
низкой, высокой и сверхвысокой плотности», представленной на соискание
ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности
02.00.04 – физическая химия

Диссертация посвящена решению актуальной задачи современной физической химии - исследованию полиформизма аморфного состояния воды, который проявляется в наличии аморфных льдов разной плотности: низкой (LDA), высокой (HAD) и "очень высокой" плотности (VHDA). В работе использовано классическое молекулярно-динамическое моделирование, с помощью которого получены компьютерные модели исследуемых льдов. Анализ моделей проведен с помощью известных в физике твердого тела методов решеточной динамики, которые дают количественные данные о колебательном (фононном) спектре системы, что позволило получить новые интересные научные результаты. Показано, что в коллективных колебаниях участвуют молекулы воды, расположенные в пространстве сложным образом, в частности, представляющие собой кластеры, где молекулы воды связаны водородными связями. Отмечены различные типы колебаний, которые являются аналогами акустических и оптических колебаний в кристаллах. Подробно изучен бозонный пик, который является характерным признаком аморфной фазы, отмечено, что колебания, дающие основной вклад в бозонный пик, являются коллективными оптическими колебаниями. Сделаны интересные заключения о существовании фазового перехода между указанными типами аморфных льдов.

Автореферат хорошо написан и структурирован, содержит всю необходимую информацию о проделанной работе. Однако в тексте встречаются жаргонизмы, например, на стр. 8 использовано неудачное выражение "вращательные колебания для льда", а на стр. 21 - "оптикоподобные колебания". Кроме того, встречаются утверждения, которые автор должен пояснить.

1. На стр. 3 написано: "Исследование бозонного пика в различных веществах показало, что его форма универсальна". Не ясно, что автор имеет здесь ввиду. Бозонный пик проявляется как избыток низкочастотных колебаний в аморфной фазе по сравнению с кристаллом. Это избыток не трудно заметить, однако выделение его (как в эксперименте, так и в моделировании) бывает недостаточно точным, чтобы обсуждать форму этого пика. Сказанное хорошо видно на рис. 11, где звездами представлены бозонные пики для разных льдов. Трудно говорить об универсальности формы этих пиков.

2. На стр. 14 автор заявляет: "и именно сетка водородных связей является причиной возникновения коллективных колебаний в аморфных



льдах". Это звучит странно, так как коллективные колебания имеют общую природу и существуют также в системах, где нет водородных связей. Водородные связи могут определять специфические свойства коллективных колебаний, но вряд ли стоит считать их причиной.

Указанные замечания не умаляют научной и практической значимости диссертационной работы Геца К.В., в которой получены важные результаты, проясняющие внутреннюю молекулярную динамику и термодинамику аморфных льдов. Она является научным исследованием, представляющим законченную научно-квалификационную работу, удовлетворяющую требованиям п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор, Гец Кирилл Викторович, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Заведующий лабораторией Молекулярной динамики и структуры
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института химической кинетики и горения им. В.В. Воеводского
Сибирского отделения Российской академии наук

д.ф.-м.н.


Медведев Николай Николаевич

Адрес: 630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, 3

Тел.: (383) 3332854

E-mail: nikmed@kinetics.nsc.ru

Подпись Н.Н. Медведева заверяю

Ученый секретарь ИХКТ СО РАН

д.ф.-м.н.





Н.А. Какуткина