

ОТЗЫВ

об автореферате диссертации К.В. Геца «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

Открытие рентгеновских лучей и последовавшие за этим работы Лауэ привели к убеждению, что подавляющее большинство твердых тел обладают кристаллографической структурой. В то же время в природе имеются и аморфные вещества, которые, естественно, явились предметом отдельного изучения. Присутствовал и прагматический интерес. Например, получаемое при помощи быстрого охлаждения из жидкой фазы аморфное железо нашло применение (высокое электросопротивление уменьшало потери на токи Фуко в высокочастотных устройствах). Однако для проникновения в природу вещей в физике принято опираться на модельные, наиболее простые, вещества. Отсюда возник интерес к свойствам затвердевшей воды. Вскоре оказалось, что указанный объект не так прост. Для твердой фазы воды характерен не только полиморфизм (существует несколько разных кристаллических модификаций льда), но и полiamорфизм – имеются три модификации твердой аморфной фазы: низкой плотности LDA, высокой плотности HDA и сверхвысокой плотности VHDA. Между этими фазами возможны фазовые переходы.

Общий подход к описанию аморфного состояния естественным образом может опираться на высказанное А. Паташинским соображение, что свойства жидкости при не слишком высоких температурах мало отличаются от свойств кристалла, в веществе сохраняются области ближнего порядка. Подобный подход оказывается вполне применимым и для описания аморфных фаз. Развитие этой идеи в практическом применении к конкретному веществу составило предмет представленной работы Кирилла Викторовича Геца.

На суд диссертационного совета представлен результат труда, посвященного решению методами теоретической и математической физики ряда актуальных задач, связанных с описанием свойств аморфных модификаций льда. Целью работы явилось изучение природы низкочастотных коллективных колебаний в аморфных льдах известных модификаций LDA, HDA, VHDA, а также связи коллективных колебаний со структурным переходом между первыми из указанных модификаций.

В рамках краткого отзыва нет никакой возможности подробно рассмотреть результаты, полученные автором диссертации, поэтому придется ограничиться лишь перечислением некоторых из них.

В рамках псевдокристаллического приближения, сочетающего методы молекулярной и решеточной динамики, построены модели, которая позволили произвести расчет колебательного спектра, функции плотности состояний и характеристики PR для различных колебаний всех трех аморфных модификаций льдов. Результаты расчетов хорошо согласуются с известными экспериментальными данными. Показано существование коллективных колебаний в аморфных льдах LDA, HAD, VHDA, что также согласуется с данными экспериментов. Высказано предположение, что коллективные колебания и водородная связь являются причиной существования фазового перехода первого рода LDA – HDA. Выполненный расчет дисперсионных кривых выявил существование кристаллоподобных акустических и оптических колебаний в аморфных льдах всех трех модификаций.

Рассчитан динамический структурный фактор аморфных льдов, что позволило проверить и обобщить проведенные ранее вычисления. Характерно, что полученный результат имеет предсказательную силу.



Проведено также изучение бозонного пика энергии в аморфных веществах. Обнаружено, что коллективные оптикоподобные колебания определяют природу бозонного пика в аморфных льдах всех типов.

При чтении автореферата, однако, возникли некоторые замечания. Наверное, главное заключается в том, что автор сосредоточил внимание на решении важных, но частных задач, но он совершенно выпустил из вида, что все изложенное представляет собой один из аспектов обширной физики аморфного состояния вещества. Следовало бы хотя бы немного остановиться на общности рассмотренного. Огорчает также некоторое количество ограхов, связанных с пренебрежением правилами русской грамматики – ошибки в падежных окончаниях, пропущенные слова. Отдельно следует указать автору на ошибки в подрисуночных подписях. Они во многих случаях не информативны, ничего не иллюстрируют. Особенно это относится к рисунку № 5. Коль скоро этот рисунок будет фигурировать на защите, автору следует четко и внятно проинтерпретировать содержание этих картинок.

Высказанные замечания носят частный характер и не снижают общее впечатление о представленной работе.

Отдельно следует отметить, что во всех случаях применен адекватный той или иной задаче математический аппарат, что дало автору диссертации хорошую возможность продемонстрировать владение различными методами математической и вычислительной физики.

Результаты, полученные К.В. Гецем освещены в научной периодике, многократно докладывались на конференциях высокого уровня и специализированных семинарах. Работы докторанта вносят существенный вклад в понимание свойств аморфного состояния вещества. Выполненный автором большой объем и качество выполненного труда достоин всяческого одобрения.

Подводя итоги сказанному, следует заключить, что представленная работа удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а автор этой работы Кирилл Викторович Гец достоин ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Доктор физико-математических наук,
профессор

Л.А. Боярский

Л.А. Боярский

Новосибирский национальный исследовательский
государственный университет

Боярский Леонид Александрович, профессор кафедры физических методов изучения твердого тела физического факультета НГУ – 630090, Новосибирск, ул. Пирогова, 2. Телефон 8 913 209 54 48 Электронная почта: boyarski1@mail.ru.

7 мая 2015 года

