

Отзыв на автореферат диссертации Геца Кирилла Викторовича

«Коллективные свойства низкочастотных колебаний в аморфных льдах низкой, высокой и сверхвысокой плотности»

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

Диссертация Геца Кирилла Викторовича посвящена теоретическому исследованию полиморфных модификаций аморфного льда, для объяснения природы и происхождения которых существуют несколько гипотез, среди которых нет общепризнанной. Поэтому попытка сравнительного анализа свойств различных модификаций с применением одного подхода является **актуальной** задачей фундаментальной науки. Основное внимание в диссертационной работе уделено изучению природы низкочастотных коллективных колебаний в аморфных льдах LDA, HDA и VHDA модификаций и связи коллективных колебаний со структурным переходом LDA – HDA.

В работе проведен большой объем молекулярных расчетов, включающих структурные и энергетические характеристики изучаемых систем с использованием современных моделей воды. В качестве структурных характеристик льдов рассчитаны радиальные функции распределения и получены оценки первых координационных чисел, совпадающие с литературными данными. На основе метода решеточной динамики проведены расчеты колебательных спектров аморфных льдов, которые сравниваются с данными для кристаллического Ih льда. Эти расчеты дали возможность автору предложить свое объяснение бозонному пику в низкочастотной области колебательного спектра. Наиболее интересным представляется расчет дисперсионных кривых, из анализа которых следует вывод о влиянии коллективного взаимодействия акустических и оптических мод на структурный переход LDA-VDA. Использование хорошо разработанного и проверенного на других системах метода решеточной динамики позволяет оценивать полученные данные как вполне достоверные.



Хотя в автореферате достаточно подробно описано содержание диссертационной работы, при чтении его возникают некоторые вопросы и замечания. Прежде всего, отсутствует описание того, каким образом создавались молекулярные ячейки для моделирования аморфных льдов. Упоминание псевдо-кристаллической ячейки ничего не поясняет. Далее, поскольку все расчеты относятся практически к абсолютному нулю, было бы полезно обсудить влияние температуры на рассматриваемые свойства.

Несмотря на эти замечания, в диссертационной работе Геца К. В. содержатся новые данные о свойствах аморфных льдов, которые позволяют значительно продвинуться в понимании их природы. Автореферат достаточно полно отражает содержание диссертационной работы. Ее автор, Гец Кирилл Викторович, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

24.04.14

*Даю согласие на включение наших персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.*

В.Н.С., д.ф.-м.н., профессор

Бродская Елена Николаевна

*Наименование организации:*

Институт химии Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный университет» (ФГБОУ ВПО СПбГУ)

*Почтовый адрес:*

198504 Санкт-Петербург, Старый Петергоф, Университетский пр., д.26

Телефон (рабочий): 8 (812) 4284093

