

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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

Аморфные льды – предмет многочисленных исследований для разработки описания различных фазовых состояний льдов и переходов между ними. Для этого автор диссертации использует метод компьютерного моделирования. Его целью является изучение природы низкочастотных колебаний в аморфных льдах LDA, HDA, VHDA и связи коллективных колебаний со структурным переходом LDA – HDA.

Гецем К.В. с высокой точностью рассчитаны дисперсионные кривые для аморфных льдов LDA, HDA и VHDA и показано, что причиной возникновения бозонного пика в аморфных льдах являются кристаллоподобные оптические колебания. Результаты расчетов сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными и показано хорошее согласие расчетов с экспериментами. В целом работа оставляет хорошее впечатление.

Есть замечания.

1. На стр. 10 автор пишет "Это говорит о стабильности структур аморфных льдов LDA, HDA и VHDA и всех молекул воды в них, а также о том, что оптимизация координат молекул воды прошла успешно." Не понятно, что автор имеет в виду, говоря о стабильности молекул воды, так как в работе используется модель жестких молекул, структура которых меняться не может.

2. Несколько, почему дисперсионные кривые, изображенные на рисунках 7 и 8, рассчитаны только вдоль одного направления по зоне Бриллюэна. Другие направления так же представляют интерес хотя бы для того, чтобы показать изотропность аморфного льда.



Судя по автореферату, диссертационная работа Геца К.В. «Коллективные свойства низкочастотных колебаний в аморфных льдах низкой, высокой и сверхвысокой плотности» является законченным научным исследованием на актуальную тему, полностью удовлетворяющим всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 02.00.04 – физическая химия, а Гец К.В заслуживает присвоения степени кандидата физико-математических наук.

Главный научный сотрудник,
доктор физ.-мат. наук, профессор
ФГБУН Институт автоматики
и электрометрии СО РАН
Телефон: 8 (383) 330-90-48
E-mail: malinovsky@iae.nsk.su

630090, г. Новосибирск, проспект Академика Коптюга, д. 1

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
автоматики и электрометрии СО РАН (ИАиЭ СО РАН)

Телефон: (383) 330-79-69
E-mail: iae@iae.nsk.su; www.iae.nsk.su

Подпись Малиновского В.К. заверяю

Учёный секретарь ФГБУН

д.т.н., с.н.с.

«13» мая 2015 года



Михляев С. В.