

Рецензия на автореферат диссертации ГЕЦА К. В.

**КОЛЛЕКТИВНЫЕ СВОЙСТВА НИЗКОЧАСТОТНЫХ КОЛЕБАНИЙ В АМОРФНЫХ ЛЬДАХ  
НИЗКОЙ, ВЫСОКОЙ И СВЕРХВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ** на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия

Диссертация К. В. Геца посвящена расчетам колебательных спектров аморфных модификаций льда на основе идеи о том, что модельные кластеры аморфных льдов низкой, высокой и сверхвысокой плотности рассматриваются в качестве элементарных ячеек некоего псевдокристалла, коллективные колебательные моды которого можно описывать в терминах теории кристаллических твердых тел. В рамках этой модели для рассматриваемых аморфных модификаций льда проведены численные расчеты радиальной функции распределения молекул кислорода, колебательной плотности состояний при сравнительно низких и высоких частотах молекулярно-решеточных колебаний, распределения молекул воды по амплитудам их колебаний и по мгновенным направлениям их векторов смещения в нормальных модах. Для низкочастотной части колебательного спектра псевдокристаллической модели получены дисперсионные зависимости частоты колебаний от квазиволнового вектора в псевдокристаллической зоне Бриллюэна, которые имеют вид, характерный для акустических и оптических ветвей. Расчеты выявляют сближение этих ветвей в области малых длин волн порядка размера суперячеек из-за смешивания акустической и оптической мод. Кроме того, выделен бозонный пик разности плотностей состояний аморфного и гексагонального льда. Высказано предположение, что конкуренция вкладов в свободную энергию от низкочастотных мод коллективных колебаний является причиной фазового перехода между аморфными фазами низкой и высокой плотности. Из рисунка 11 хорошо видно, что уменьшение плотности, связанное с увеличением степени аморфизации, что означает уменьшение константы связи между суперячейками псевдокристалла, вызывает рост бозонного пика, который характеризует степень отличия состояния от кристаллической фазы. Эти результаты являются новыми и представляют несомненный интерес.

Автореферат написан грамотно, хорошим языком и вполне отражает смысл результатов диссертации. При этом можно высказать следующие замечания:

1. на стр. 15 опечатка, написано «вне центра зоны Бриллюэна (то есть при  $k \neq 0$ ), где частоты акустических колебаний равны нулю» - в акустической ветви частоты не равны нулю.

2. На рисунках 7-9 надо догадываться, что единица измерения размера зоны Бриллюэна есть обратный размер суперячейки, но в аморфных структурах должен существовать статистический разброс этой величины и результаты у границ зоны Бриллюэна не вызывают большого доверия, как и использованные периодические граничные условия.

3. Использованный на стр. 17 термин «акустооптический резонанс» относится скорее к акустооптике, то есть к резонансной дифракции света на ультразвуке при пересечении спектральных кривых фотонной и упругой волн. Здесь следовало бы воспользоваться другим термином.

Однако эти замечания не снижают общее положительное впечатление от работы. Считаю, что в диссертации получены новые интересные результаты, а К. В. Гец достоин присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Доктор физико-математических наук,  
профессор Новосибирского государственного  
технического университета



Ю. Г. Пейсахович

