

**Отзыв на автореферат диссертационной работы К.В. Гец
«Коллективные свойства низкочастотных колебаний
в аморфных льдах низкой, высокой и сверхвысокой плотности»,
представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук
по специальности 02.00.04 – физическая химия**

В диссертационной работе К.В. Гец расчетными методами изучаются основные термодинамические характеристики новых объектов, таких как аморфные льды различной плотности (низкой, высокой и сверхвысокой - LDA, HAD, VHDA). Несомненна актуальность проведённой работы, которая направлена на расширение объектов для моделирования методами молекулярной и решёточной динамики, включая такие сложные структуры как аморфные льды, не обладающие дальним порядком. В работе исследуются вопросы влияния низкочастотных коллективных колебаний на термодинамические свойства льдов и механизмы фазовых переходов. На основе комбинированного подхода, сочетающего методы молекулярной и решёточной динамики, в диссертации впервые решается задача построения теоретической модели аморфных льдов, на основе которой производятся расчёты колебательных спектров. Важным результатом исследовательской работы является вывод о «кристаллоподобии» коллективных колебаний аморфных льдов различной плотности. В частности, перспективным результатом является выявление существования акустических и кристаллоподобных оптических колебаний в аморфных льдах, что может послужить основой для спектроскопических методов диагностики фазовых переходов. Высказано предположение о причинах низкой теплопроводности аморфных льдов, которая связывается с существованием низкочастотного колебательного резонанса, что подлежит дальнейшей экспериментальной проверке. Выяснено, что появление «бозонного пика» связано с деформацией сетки водородных связей, возникающей при аморфизации кристаллического льда. В качестве замечания отметим, что в автореферате нечетко обоснован выбор размера «суперячеек» при описании аморфных льдов в квазикристаллическом приближении.

Диссертация К.В. Гец представляется целостной и логически завершённой работой. Результаты диссертации несомненно будут востребованы при дальнейшем развитии исследований в области изучения структуры и свойств льдов. Следует отметить, что апробация результатов работы проведена в авторитетных изданиях международного уровня, количество публикаций значительно превышает необходимый минимум, установленный ВАК Минобрнауки России.

Автореферат отражает основные результаты диссертационной работы и обосновывает выводы защищаемых положений. Обоснованность результатов и защищаемых положений диссертации, их научная и практическая ценность сомнений не вызывает. Соискатель Гец Кирилл Викторович заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Главный научный сотрудник
Центра разработки и эксплуатации газовых
и нефтегазовых месторождений
д. х. н., профессор
Ведущий научный сотрудник
Центра ресурсов и запасов углеводородов
к. ф.-м. н.

Подписи В.А. Истомина и С.И. Долгаева заведены

Адрес: ООО «Газпром ВНИИГАЗ» 142717 п
Тел.: +7 498 657 4206
Электронная почта: V_Istomin@vniigaz.gazp

В.А. Истомин

С.И. Долгаев

О.В. Сидорова

Московская обл.

анцелярия
НХ СО РАН
05 2015
617901