

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы 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

В работе ГЕЦА К.В. детально изучена колебательная динамика различных фаз аморфных льдов, причем особое внимание уделено динамическому поведению молекул в низкочастотной области. Для всех трех фаз известных аморфных льдов построены структурные модели в псевдокристаллическом приближении. Адекватность этих моделей подтверждается как при помощи прямого сравнения парной функции распределения для всех изученных структур, так и последующего сравнения полученных результатов для динамики молекул исследуемых объектов с доступными экспериментальными данными. Моделирование проводилось комбинированным подходом с использованием методов молекулярной и решеточной динамики. Детально изучены динамические особенности поведения псевдокристаллов аморфных льдов. Показано, что колебания в аморфных льдах носят коллективный характер, изучена фононная дисперсия, рассчитан динамический структурный фактор. Кроме того, расчеты показали существование низкочастотного колебательного резонанса, который может быть причиной низкой теплопроводности аморфных льдов, а также прояснена природа низкочастотного бозонного пика, характерного для аморфных соединений. Предложена гипотеза о природе фазового перехода первого рода между аморфными льдами низкой и высокой плотности и её связи с низкочастотными коллективными колебаниями.

Защищаемые положения обладают научной новизной. В их основе – детально проработанная теория, которая хорошо воспроизводит известные экспериментальные данные. Сильной стороной построенной теории является ее предсказательная способность, которая должна быть востребована экспериментаторами, работающими в этой области.

Исследования проведены по актуальной проблематике и вносят существенный вклад в развитие термодинамики аморфных фаз не только льдов, но и других веществ. Все это характеризует ГЕЦА К.В. как высококвалифицированного исследователя, который заслуживает присуждение ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 02.00.04 – физическая химия.

Приглашенный профессор Физико-технического факультета  
Евразийского Национального Университета им. Л. Н. Гумилева

Кандидат физико-математических наук

Подпись ИНЕРБАЕВА Т. М. заверяю  
Ученый Секретарь  
Евразийского Национального Университета им. Л. Н. Гумилева

Кандидат педагогических наук, доцент

