

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Куца Д.А. «Статистико-геометрический анализ структуры однокомпонентных простых жидкостей», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

В работе Куца Д.А. решается важная и актуальная задача – изучение структуры неупорядоченных жидкостей. Эта задача представляет большой интерес как с теоретической, так и с практической точек зрения. Здесь следует отметить, что при моделировании и исследовании неупорядоченных систем, имеется стандартный набор средств и инструментов, которые используются в большинстве работ посвященных этой теме. К ним можно отнести функцию радиального распределения атомов (RDF), автокорреляционную функцию скорости (A), коэффициент диффузии (D) и др. Однако, анализ неупорядоченных систем с помощью многогранников Вороного — Делоне встречается не так часто как указанный выше набор. Возможно, это связано как с математической сложностью алгоритмов используемых в этих методах, так и со сложностью работы с программным обеспечением реализующих эти алгоритмы. Сложность также представляет и анализ результатов полученных этими методами. Здесь следует отметить большой вклад Уральской школы (г. Челябинск) и Новосибирской школы (Медведев Н.Н.) исследователей в развитии и применении метода Вороного — Делоне. Таким образом важность и актуальность работы Куца Д.А. не вызывает сомнений. В разделе новизна автор приводит 3 пункта. Наиболее важные из них являются пункты 2 и 3. С их помощью автору удалось выделить ряд фазовых переходов в зависимости от плотности упаковки.

В качестве основных методов моделирования неупорядоченных систем автор использует методы молекулярной динамики и Монте-Карло. При этом он использует простейшие потенциалы межатомного взаимодействия: модель твердых сфер и потенциал Леннарда — Джонса. Здесь можно было бы порекомендовать автору использовать более точные и более современные потенциалы: потенциал Саттона — Чена и метод погруженного атома. А в качестве методов моделирования методы первопринципной молекулярной динамики (*ab initio MD*). В настоящее время имеется достаточно много пакетов реализующих этот метод (CPMD, CP2K, SIESTA и др.) Правда эти методы требуют много машинного времени и наличие суперкомпьютеров. Но в г. Челябинске имеются достаточно мощные суперкомпьютеры и необходимое программное обеспечение. В качестве пожелания дальнейшего развития

предложенного автором подхода, можно пожелать распространить его метод на двойные и тройные системы, где неизбежно возникают направленные ковалентные связи.

В целом можно отметить, что автор получил ряд важных результатов, которые описаны в автореферате и представлены на многочисленных рисунках и таблицах. Полученные результаты, хорошо согласуются с экспериментом и правильно интерпретируются автором. Этот факт говорит о высоком уровне автора как, в области эксперимента, так и в области расчетов и вычислительной техники

Работа хорошо апробирована на различных Российских и международных конференциях. Результаты работы представлены во многих публикациях автора. Автореферат хорошо оформлен с большим количеством фактического материала (графики, рисунки, таблицы). В целом, данная диссертационная работа по актуальности решаемых задач, объему выполненных исследований и совокупности полученных результатов отвечает всем требованиям, предъявляемым ВАК к кандидатским диссертациям, а ее автор **Куц Дмитрий Анатольевич** заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 "Физика конденсированного состояния".

26.10.14 г.Ижевск

Старший научный
сотрудник УдГУ, к.ф.-м.н.

Митрохин Ю.С.

Митрохин Юрий Степанович

426034, г. Ижевск, ул. Университетская 1, Удмуртский государственный университет

тел. 8 (3412) 916089 раб, 8 (3412) 720263 дом.,

E-mail: mit@uni.udm.ru,

старший научный сотрудник лаборатории параллельных вычислений, доцент.

Подпись *Ю.С. Митрохин*
верна: начальник отдела
делопроизводства



И.Н. Дворская