

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Воронцова Александра Геннадьевича «Структурообразование в простых металлических системах в жидкой фазе и при переходе пар-жидкость», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

С середины прошлого века жидкие металлы стали самостоятельным объектом исследований. Связано это было, в первую очередь, с тем, что жидкая фаза, в большинстве процессов является предшествующей кристаллическому состоянию.

С другой стороны расплавы металлов перспективны для использования в качестве теплоносителей в ядерных реакторах, так как обладают подходящим комплексом теплофизических и физико-химических свойств. Учитывая сложные, напряженные условия эксплуатации энергетических систем и связанные с ними риски, вопросы о достоверности и надежности данных о строении и свойствах металлических расплавов имеют особенно важное значение. Касается это и возможности предсказания свойств теплоносителя в широком диапазоне температур и плотностей, отвечающих как штатным, так и нештатным режимам работы установок. Экспериментальное изучение металлических систем во всей области существования жидкой фазы затруднено, особенно в области высоких температур, давления, а так же связано ограниченным числом методик исследований, именно поэтому важное значение приобретают теоретические работы и компьютерный эксперимент. В связи с вышеизложенным работа Воронцова А.Г. является, безусловно, актуальной.

К важным результатам работы можно отнести общий характер перехода от плотной упаковки к рыхлой для всех простых жидкостей при плотности упаковки твердых сфер в области 0.3. Связь изменения атомной структуры с изменениями электронной структуры. Пожалуй, один из интересных и важных результатов это структурирование самих кластеров, в которых существуют как внутренняя часть (ядро) так поверхностные слои. Следует отметить, что в настоящее время однозначного подхода к строению кластеров не существует.

Главным достижением работы, судя по автореферату, является количественное описание изменений, происходящих в структуре жидких металлов на микроскопическом уровне. Результаты работы, с одной стороны, позволяют объяснить появление особенностей на политермах различных свойств жидких металлов, с другой стороны, прогнозировать появление сходных особенностей для веществ, слабо изученных на сегодняшний день. Представленные результаты получены методом математического моделирования и базируются на фундаментальных физико-химических принципах, современных методах численного анализа. Материал в реферате изложен ясно, в логической последовательности.

Полученные в работе результаты являются важными для понимания строения и свойств металлически жидкостей.


В качестве замечаний:

- Из текста автореферата неясно, какие методики моделирования и анализа атомной структуры были проанализированы во второй главе.
- Чем обусловлен выбор потенциала Ленарда-Джонса для расчетов?
- Вопрос о первостепенности электронной подсистемы или атомной структуры при формировании кластеров в жидкости в работе не затрагивается.
- Из работы не совсем ясно является ли структура исследованной жидкости однофазной, двухфазной или имеет какие-либо другие особенности.
- Область применимости указанных в работе методик не совсем ясна.


Указанные замечание не носят принципиальный характер и не снижает общей положительной оценки работы, как важного исследования в области строения и свойств металлических жидкостей, имеющего несомненную научную и практическую значимость.

Полагаем, что данная диссертационная работа отвечает требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор Воронцов Александр Геннадьевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Холзаков Александр Владимирович,  
кандидат физ.-мат. наук  
зав. лабораторией рентгеновской  
электронной спектроскопии  
Физико-технического института УрО РАН  
426000, г. Ижевск, ул. Кирова 132, ФТИ УрО РАН  
тел. 8(3412) 432539, e-mail: xps@ftiudm.ru

  
10.11.2014

Шабанова Ирина Николаевна,  
доктор физ.-мат. Наук, профессор,  
Главный научный сотрудник  
лаборатории рентгеновской  
электронной спектроскопии  
Физико-технического института УрО РАН  
426000, г. Ижевск, ул. Кирова 132, ФТИ УрО РАН  
тел. 8(3412) 432539, e-mail: xps@ftiudm.ru

  
10.11.2014

Подпись Холзакова А.В., и Шабановой И.Н.  
Заверяю  
Ученый секретарь ФТИ УрО РАН  
Гончаров Олег Юрьевич

