

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Д.Н. Соколова

«Изучение термодинамических и структурных характеристик наночастиц металлов в процессах плавления и кристаллизации: теория и компьютерное моделирование»,

представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

В настоящее создание и использование систем, содержащих наноразмерные элементы, представляют собой одно из наиболее многообещающих направлений развития науки и техники. Различного рода наночастицы уже находят самое широкое применения в производстве инновационных материалов с уникальными свойствами. В частности, металлические наночастицы обладают широкими перспективами использования как в области классической электроники, так и в области оптических вычислительных и телекоммуникационных систем. С позиции практического применения металлических наночастиц необходимо глубокое понимание основных закономерностей их формирования и разрушения, а также влияния параметров внешней среды на их структурные характеристики. Зачастую исследование отдельных наночастиц экспериментальными методами представляется невозможным, и для решения вышеупомянутых задач необходимо применять теоретические методы и методы компьютерного моделирования. В представленной работе Д.Н. Соколова метод компьютерного моделирования методом Монте-Карло используется для исследования изменения термодинамических и структурных характеристик нанокластеров золота, меди, алюминия и кобальта при кристаллизации и плавлении частиц.

В автореферате дополнительно к общей характеристике работы приводится краткое содержание ее глав.

Глава 1 посвящена обзору основных вычислительных и экспериментальных методов, используемых при изучении наносистем, и приведены отдельные результаты исследования поведения наночастиц при фазовых переходах первого рода классическими методами моделирования. Даны основные соотношения, описывающие размерную зависимость температуры плавления наночастиц. Рассмотрены подходы к экспериментальному исследованию процессов плавления и кристаллизации наночастиц.

В **Главе 2** автор приводит методику исследования термодинамических и структурных характеристик нанокластеров металлов с использованием компьютерного моделирования методом Монте-Карло с использованием классического алгоритма Метрополиса и многочастичного потенциала Гупта для описания межатомных взаимодействий в металлических наночастицах. Моделирование выполнялось для нескольких начальных конфигураций исследуемых нанокластеров, и полученные для них результаты усреднялись. Фазовые переходы идентифицировались по изменению либо термодинамических, либо структурных характеристик исследуемых систем.

Важной частью главы является исследование методических вопросов проводимого моделирования, а именно изучение изменения формы и структурного строения нанокластеров металлов в процессе плавления или кристаллизации, а также рассмотрен вопрос идентификации фазового перехода первого рода в исследуемых системах. Показано, что признаком такого фазового перехода может являться резкое изменение в нанокластерах первого координационного числа (Z_1). Также было обнаружено, что при приближении к точке плавления у нанокластеров может формироваться «жидкая шуба» - поверхностный слой с нераспознанной кристаллической структурой.

Глава 3 содержит описание и обсуждение результатов, полученных при моделировании методом Монте-Карло фазовых переходов (плавления и кристаллизации) нанокластеров металлов. Особое внимание уделяется исследованию гистерезиса температур плавления-кристаллизации в исследуемых системах и его зависимости от размера нанокластера. Также выполнено исследование процессов кристаллизации и плавления металлических наночастиц с точки зрения изменения их структуры. Автором показаны процессы перехода различных типов кристаллических решеток друг в друга при

охлаждении и нагревании наночастиц различных металлов и выполнен детальный анализ структуры нанокластеров. Кроме того, в данной главе приведены результаты исследований влияния дефектов кристаллической структуры нанокластеров на их свойства, в частности на температуру плавления и величину удельной избыточной поверхностной энергии.

Глава 4 посвящена описанию термодинамического подхода к исследованию размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации и других термодинамических характеристик металлических наночастиц. На примере олова и меди автором были рассчитаны размерные зависимости температуры кристаллизации наночастиц при учете наличия поверхностной «жидкой шубы» вблизи точки плавления. Также были выполнены оценки размерных зависимостей теплот плавления и кристаллизации наночастиц. Дополнительно в данной главе изложены результаты исследования размерной зависимости температуры плавления наноразмерных по толщине металлических пленок (свободных или на подложке).

Автореферат заканчивается десятью выводами по результатам работы и списком публикаций автора.

Представленный в автореферате материал изложен на высоком уровне. Работа Д.Н. Соколова представляет собой целостное, подробное законченное исследование, имеющее значение как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения.

В качестве замечания по автореферату хотелось бы отметить следующее: в обсуждении результатов главы 3 автор отмечает, что величина гистерезиса между температурами плавления и кристаллизации увеличивается по мере увеличения размера нанокластера. При этом утверждается, что при переходе к макроскопическим системам ширина этой температурной области должна резко уменьшиться. Было бы небезынтересным привести оценку размеров кластеров, при которых должен наблюдаться упомянутый переход.

На основании автореферата можно заключить, что диссертация Д.Н. Соколова «Изучение термодинамических и структурных характеристик наночастиц металлов в процессах плавления и кристаллизации: теория и компьютерное моделирование» удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям (пункт 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842). Несомненно, ее автор *Денис Николаевич Соколов*, заслуживает присуждения ему степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния. Результаты диссертации отражены в 42 печатных работах, в том числе в 22 публикациях в рецензируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК.

12 апреля 2016 г.

Кандидат физико-математических наук,
исполняющий обязанности заместителя директора
Федерального государственного бюджетного учреждения
науки Института высокомолекулярных соединений
Российской академии наук

Сергей Владимирович Ларин

Рабочий адрес: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук
199004, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., д. 31
тел. +7 (812) 323-02-16; e-mail: selarin@macro.ru

