

УТВЕРЖДАЮ
Ректор ФГБОУ ВО
«Тверской государственный технический
университет» д.ф.-м.н., профессор

А.В. Твардовский

« 02 » _____ 2020 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации «Тверской государственный технический университет» на диссертационную работу Колосова Андрея Юрьевича «Моделирование процессов коалесценции и спекания в моно- и биметаллических наносистемах», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

1. Актуальность темы диссертации

Диссертационная работа А.Ю. Колосова посвящена моделированию методом Монте-Карло процессов коалесценции и спекания наночастиц металлов.

В настоящее время общепризнана перспективность наноматериалов для применения в различных областях науки и техники. Однако получение наночастиц и наноструктур, а также экспериментальные исследования в этой области являются технологически достаточно труднореализуемыми и дорогостоящими. Поэтому разработка численных и аналитических методов прогнозирования свойств наночастиц и наносистем, а также теоретическое описание процессов их формирования и эволюции является актуальной.

В настоящее время чаще всего для компьютерного моделирования наносистем используется метод молекулярной динамики (МД), основанный на детерминированном подходе к описанию процессов взаимодействия атомов и молекул. Вместе с тем статистический метод Монте-Карло также позволяет успешно рассчитывать термодинамические и структурные характеристики наночастиц, в том числе в процессах плавления и кристаллизации. К настоящему времени количество работ, использующих метод Монте-Карло, существенно уступает количеству работ по молекулярно-динамическому моделированию. С этой точки зрения выполненное в работе А.Ю. Колосова развитие метода Монте-Карло, в известной степени альтернативного методу МД, также следует признать актуальным.

2. Краткий анализ содержания диссертации

Во введении традиционно обосновывается актуальность темы исследований, сформулированы цели и задачи диссертации, перечислены полученные результаты, дана характеристика их научно-практической ценности, а также аргументируются их обоснованность и достоверность. Также во введении приведены положения, выносимые на защиту, и в кратком изложении описано содержание разделов диссертации.

В первой главе представлен обзор основных направлений исследования процессов коалесценции и спекания. Рассмотрены особенности коалесценции наночастиц различных металлов и коалесценции как процесса управления структурой. Описана методика оценки зависимости минимального размера наночастиц металлов от температуры при коалесценции, а также теоретические модели описания формы манжеты при коалесценции и спекании наночастиц металлов и при сцеплении твердых наночастиц жидкими манжетами. Рассмотрены стадии формирования манжеты и доминантные механизмы спекания между сферическими наночастицами. На основании анализа литературных источников делается вывод о необходимости дополнительных исследований процессов коалесценции и спекания наночастиц, что является целью диссертационной работы.

Во второй главе описана методика проведения компьютерного эксперимента по моделированию нанокластеров металлов с использованием метода Монте-Карло, анализируется возможность применения потенциала Гупты для описания межатомного взаимодействия в металлических системах. Кроме того, анализируются альтернативные методы моделирования процессов коалесценции и спекания металлических наносистем. Рассмотрен алгоритм программы Metropolis, его возможности, а также дополнительное программное обеспечение для проведения моделирования и анализа результатов. Проведена оценка двугранных углов манжеты в процессах коалесценции и спекания наночастиц, описаны алгоритмы оценки и возможности программ.

Важным научным результатом второй главы, на наш взгляд, является методика оценки двугранного угла при коалесценции наночастиц и, соответственно, оценка соотношения зернограничной и поверхностной энергий.

Третья глава занимает центральное место в работе. Она посвящена описанию и анализу результатов компьютерного моделирования методом Монте-Карло процессов коалесценции и спекания нанокластеров металлов. Проведена оценка влияния формы манжеты жидкости между двумя сферическими наночастицами на размерные зависимости термодинамических характеристик. Рассмотрены закономерности изменения термодинамических и структурных характеристик в процессах коалесценции и спекания для нанокластеров металлов различной

геометрической формы. Проведено моделирование процесса формирования наноконтактов между дорожками наноразмерной шины и выявлены оптимальные параметры системы для образования стабильных конфигураций. Рассмотрены и проанализированы закономерности формирования моно- и биметаллических наночастиц в процессах коалесценции и спекания на примере биметаллической системы Ni-Cu. Исследованы процессы диффузии вблизи границ раздела металлов в наносплавах в процессе плавления.

Важными научными результатами третьей главы являются:

- обоснование основных механизмов коалесценции наночастиц (поверхностная и межзеренная диффузия), определение коэффициентов диффузии и анализ влияния вакансий на процессы диффузии,
- определение температурного диапазона стабильности и устойчивости наносистем,
- установление размерной зависимости термодинамических характеристик наносистем.

3. Научная значимость результатов

С научной точки зрения наибольший интерес, на наш взгляд, представляют следующие методики и результаты диссертации А.Ю. Колосова:

- методика оценки двугранного угла при коалесценции наночастиц металлов и оценки соотношения зернограничной и поверхностной энергий,
- установление размерной зависимости термодинамических характеристик наносистем и их влияния на процессы коалесценции и спекания наночастиц,
- определение коэффициентов диффузии для наночастиц металлов и анализ влияния вакансий на процессы диффузии.

Эти результаты развивают теоретические представления о процессах консолидации материалов на наноуровне и позволяют наметить и обосновать пути управления этими процессами.

4. Практическая значимость результатов

Как отмечает автор, результаты исследований, выполненных в рамках диссертационной работы, могут быть использованы и уже используются в процессах управляемой коалесценции, что представляет интерес для создания изделий наноэлектроники, для создания наноматериалов с заданными свойствами, для улучшения адсорбционных и каталитических свойств наночастиц, повышения коррозионной стойкости материалов.

5. Степень обоснованности научных положений и выводов, сформулированных в диссертации, их достоверность и новизна

Выводы, сформулированные в диссертации, логично вытекают из результатов исследований автора. Их обоснованность и достоверность

подкрепляется следующими аргументами. Используемые в работе численные модели наносистем разработаны на основании признанных закономерностей фундаментальных наук, в том числе это касается используемого в расчетах потенциала межатомного взаимодействия. Полученные результаты не противоречат известным результатам других исследователей, как теоретическим, так и экспериментальным (при наличии последних). Можно согласиться с автором, что в пользу обоснованности и достоверности результатов исследования говорит тот факт, что часть из них получена в рамках грантов РФФИ и Минобрнауки РФ, следовательно, заявки получили положительную оценку в ходе научной экспертизы.

Научная общественность имела возможность подробно ознакомиться и оценить результаты исследований автора данной диссертационной работы. Материалы диссертации были опубликованы в 80 печатных работах, из них 22 в рецензируемых научных изданиях (включая издания, входящие в международные базы данных Scopus и Web of Science), докладывались на 18 научных конференциях. А.Ю. Колосов входит также в число соавторов 6 свидетельств о регистрации программ для ЭВМ.

6. Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации

Установленные в диссертационной работе механизмы и закономерности коалесценции наночастиц и спекания твердых наночастиц как важных элементарных процессов технологии получения металлических нанопорошков и технологии порошковой металлургии на наномасштабном уровне могут быть использованы в РЦКП ФГБУН «Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мерджанова Российской академии наук», в лаборатории физикохимии поверхности и ультрадисперсных порошковых материалов № 29 ФГБУН «Институт металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова Российской академии наук». Методики изучения размерных зависимостей структурных и термодинамических характеристик металлических наносистем с использованием атомистического моделирования могут найти свое применение в ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова», НИТУ «МИСиС» и ряде других научных учреждений России, ведущих исследования по аналогичной тематике.

7. Замечания и вопросы по диссертации

Основные замечания следующие.

1. Метод Монте-Карло является статистическим, поэтому при одних и тех же начальных условиях результаты моделирования будут в той или иной степени варьироваться в серии компьютерных экспериментов. В диссертации этот аспект не обсуждается и никаких характеристик разброса

количественных параметров, полученных в серии запусков программы моделирования не приводится. Указывается лишь, что проводилось усреднение результатов расчетов. Следовало бы привести среднее квадратическое отклонение, коэффициент вариации или иные характеристики разброса результатов. Эта информация представляла бы самостоятельную научную ценность.

2. При моделировании процессов коалесценции наночастиц поверхность последних считается ювенильной. Эта предпосылка в реальности выполняется только в условиях высокого вакуума. В реальных условиях даже на поверхности благородных металлов присутствуют адсорбированные атомы и молекулы атмосферных газов, влаги и т.п. Присутствие адсорбированных частиц может существенно повлиять на потенциал межчастичного взаимодействия и, в конечном счете, на процессы коалесценции и спекания. Этот аспект в диссертации не обсуждается.

3. Нигде не поясняется происхождение и назначение жидкости, образующей капиллярный мостик (манжету по терминологии автора) между металлическими частицами (раздел 3.1 диссертации). Без этой информации необходимость присутствия этого раздела в работе непонятна.

4. Исследование процессов коалесценции с помощью компьютерной модели выполнено для пяти металлов (Au, Ag, Cu, Ni, Al) с одинаковой кристаллической решеткой (ГЦК). Чем вызвана необходимость исследования такого числа близких по структуре и свойствам металлов? Было бы целесообразно в целях общности результатов ограничиться меньшим числом близких по свойствам металлов и исследовать хотя бы по одному представителю металлов с другими кристаллическими структурами.

Имеются также менее принципиальные замечания.

Литературный обзор (раздел 1 диссертации) носит скорее констатирующий, чем аналитический характер. Его следовало бы завершить кратким резюме, содержащим перечень нерешенных или недостаточно исследованных проблем по теме диссертации, на основании чего и формулируется цель и задачи исследования.

В тексте имеются опечатки и неудачные выражения (стр. 25, 29, 31, 36,37), не искажающие, впрочем, сути излагаемого материала.

8. Заключение

Диссертационная работа А.Ю. Колосова является самостоятельной и законченной научно-квалификационной работой, выполнена на актуальную тему, обладает научной новизной и практической ценностью. Работа выполнена на высоком научном уровне и вносит существенный вклад в представления о закономерностях процессов коалесценции и спекания в моно- и биметаллических наночастицах. Результаты,

полученные автором, представляются достоверными, а сделанные в работе выводы – обоснованными.

Приведенные замечания не изменяют общей положительной оценки диссертационной работы и не снижают ее ценность.

Содержание диссертации достаточно полно отражено в опубликованных научных работах, докладах на конференциях и семинарах. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации и позволяет составить адекватное представление о выполненных исследованиях и полученных результатах.

Таким образом, диссертационная работа А.Ю. Колосова отвечает критериям «Положения о присуждении ученых степеней» (п. 9 – п. 14), утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013, соответствует паспорту специальности научных работников «Физика конденсированного состояния», а ее автор, Колосов Андрей Юрьевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Отзыв на диссертационную работу А.Ю. Колосова рассмотрен и утвержден единогласно на расширенном заседании кафедры «Прикладная физика» Тверского государственного технического университета (протокол № 2 от 01.12. 2020 года).

Профессор кафедры «Прикладная физика»
ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет»
доктор технических наук, профессор

Владимир Васильевич Измайлов

170026, г. Тверь, наб. Афанасия Никитина, 22.
Тел. (4822)78-88-80, email: iz2v@tvcom.ru