

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию
Колосова Андрея Юрьевича

на тему: «Моделирование процессов коалесценции и спекания в моно- и биметаллических наносистемах», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Актуальность темы диссертации, представленной А.Ю. Колосовым определяется огромным значением наночастиц и наноструктурированных систем для современного материаловедения, микроэлектроники и нанотехнологий в целом как отдельной отрасли науки. Синтез наночастиц, создание и практическое использование наноструктурированных систем требуют глубинного понимания механизмов, обуславливающих специфические свойства и поведение наноразмерных систем по сравнению с поведением материалов на макроскопическом уровне. Очевидно, что экспериментальное исследование процессов, протекающих на уровне отдельных атомов при взаимодействии наночастиц и нанокластеров, является нетривиальной задачей, требующей привлечения как дорогостоящего оборудования, так и создания специфических условий выполнения эксперимента. В то же время современный уровень развития вычислительной техники и методов компьютерного моделирования позволяет с высокой степенью достоверности исследовать протекание различных процессов в наноразмерных системах, определять их механизмы и факторы, влияющие на них.

В работе исследуются термодинамические и структурные характеристики моно- и биметаллических нанокластеров на основе золота, меди, алюминия и никеля в процессах коалесценции и спекания, а также влияние ряда параметров систем (таких как размер, температур, формы и взаимное расположение кластеров и т.д.) на протекание этих процессов.

Научная новизна работы определяется тем, что в ней были получены новые результаты, а именно:

- исследованы размерные зависимости избыточной свободной энергии манжеты при различных приближениях ее формы, и предложена методика оценки стабильности жидкой манжеты между наночастицами на основе анализа изотерм расклинивающего давления;

- проведено моделирование методом Монте-Карло процессов коалесценции и спекания моно- и биметаллических наночастиц и наносистем различной

конфигурации и состава, что позволило выявить особенности изученных процессов для разных типов металлов при различных начальных конфигурациях систем;

- установлено влияние размерных зависимостей термодинамических характеристик на скорость протекания процесса коалесценции наночастиц;

- рассчитаны коэффициенты диффузии различных металлов в наноразмерном диапазоне при учете влияния дефектов поверхности нанокристаллов на поверхностную и объемную диффузию;

- описан способ формирования биметаллической системы никель – медь, который может использоваться для разработки методов синтеза полиметаллических наноматериалов;

- процессы коалесценции и спекания впервые рассмотрены как управляемые процессы с целью их применения для выполнения нанопайки, в том числе найдены температурные диапазоны стабильности наноконтактов, определены геометрические и структурные характеристики наноконтактов между дорожками наноразмерных шин.

Не вызывает сомнений **теоретическая и практическая значимость результатов**, полученных в работе, которая заключается в следующем:

- предложен и апробирован подход к моделированию процессов коалесценции и спекания металлических наночастиц с использованием метода Монте-Карло, позволяющий исследовать изменение термодинамических и структурных характеристик наночастиц при их взаимодействии;

- оптимизированы методики определения коэффициентов диффузии для моно- и биметаллических систем;

- полученные в результате работы закономерности и механизмы процессов коалесценции и спекания металлических наночастиц могут использоваться для корректного определения размерных и температурных интервалов функционирования устройств на основе наноразмерных элементов, а также корректной оценки факторов, влияющих на стабильность наноструктурных элементов.

Диссертационная работа представляет собой целостное, завершенное исследование. Диссертация имеет традиционную структуру, включающую введение, три главы, заключение и список цитируемой литературы, содержащий 187 источников.

Первая глава содержит обзор основных направлений исследования процессов коалесценции и спекания. В том числе рассмотрены особенности коалесценции наночастиц различных металлов и доминантные механизмы спекания между сферическими наночастицами.

Во второй главе приведены описания методики моделирования термодинамических и структурных характеристик нанокластеров металлов с использованием метода Монте-Карло. Дано обоснование используемых методик моделирования, потенциалов и их параметров. Рассмотрены алгоритмы программного обеспечения, используемого в работе для моделирования и анализа полученных результатов.

Третья глава содержит основные результаты, полученные в работе с использованием как метода Монте-Карло, так и методом молекулярной динамики. В главе приводится анализ полученных результатов и формулируются основные выводы по работе. К наиболее важным полученным результатам можно отнести следующее:

- определение температурного диапазона стабильности взаимодействующих металлических наночастиц и условий, влияющих на протекание процессов коалесценции и спекания таких частиц;

- изучение возможности применения процесса коалесценции наночастиц как способа нанопайки, изучение различных схем наноконтактов между дорожками наноразмерных шин;

- установление закономерностей и особенностей формирования наночастиц металлов в процессе коалесценции моно- и биметаллических систем;

- определены основные механизмы коалесценции металлических наночастиц (в том числе поверхностная и межзеренная диффузия), установлены коэффициенты диффузии для различных металлов и влияние дефектов поверхности на процессы диффузии;

- описано формирование биметаллической системы никель – медь, что может использоваться для разработки методов синтеза полиметаллических наноматериалов различных композиций.

К диссертационной работе имеется ряд **вопросов и замечаний**:

1. Традиционно первая глава диссертации посвящена обзору литературных источников по теме диссертации, тогда как остальные главы содержат преимущественно оригинальные результаты диссертационного исследования. Однако, в части разделов главы 1 автором приведены результаты собственных работ, что затрудняет восприятие и оценку результатов представленного диссертационного исследования. Так, в разделе 1.4 приведено подробное описание математической модели поверхности мениска жидкости между сферическими частицами, построение которой выполнено автором работы. Полагаю, что более коррект-

ным было бы вынесение всех результатов собственных работ автора в последующие главы диссертации с соответствующими ссылками (при необходимости) в тексте главы 1.

2. Несмотря на то, что метод Монте-Карло и метод молекулярной динамики являются достаточно широко используемыми и хорошо описанными методами моделирования, было бы целесообразно привести в разделе 2.1 их более детальное описание, включая математический базис указанных методов и, возможно, общую блок-схему используемых алгоритмов.
3. В разделе 3.1 говорится, что «потенциал взаимодействия твердой фазы (алюминий) задавался в форме потенциала Шиффа, в то время как взаимодействия в пленке декана задавалась потенциалом Леннарда-Джонса», но в работе не приводятся ни сами функциональные формы указанных потенциалов, ни значения их параметров, что затрудняет оценку полученных результатов.
4. В диссертации проведено моделирование коалесценции наночастиц золота и алюминия, имеющих существенно различающиеся размеры. Для таких систем наблюдается эффект «прилипания» наночастицы меньшего размера с дальнейшим увеличением площади контакта (стр. 110-114). Было интересным исследовать данный процесс для наночастиц различающихся металлов, которые, например, существенно отличаются значениями поверхностного натяжения и определить какие эффекты будут преобладать в таких системах: сегрегационные или диффузионные?

Необходимо отметить, что указанные вопросы и замечания носят уточняющий характер, не влияют на общую положительную оценку работы и не снижают ее научную и практическую ценность.

Материалы диссертации были опубликованы в 80 печатных работах, в том числе в 22 работах в рецензируемых научных изданиях (включая издания, входящие в международные базы данных Scopus и Web of Science), одобренных ВАК РФ. Получено 6 свидетельств о регистрации программ на ЭВМ. Автореферат полностью отражает содержание диссертационной работы.

Таким образом, диссертация Колосова Андрея Юрьевича на соискание ученой степени кандидата наук является научно-квалификационной работой, в которой на высоком научном уровне выполнено исследование процессов коалесценции и спекания металлических наночастиц с использованием методом

компьютерного моделирования. Диссертационная работа выполнена на актуальную тему, обладает научной новизной, практической ценностью, является самостоятельной и законченной научно-квалификационной работой. Опубликованные работы отражают основное содержание диссертации. Диссертационная работа отвечает критериям «Положения о присуждении ученых степеней» (п. 9 – п. 14), утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 (с изменениями), 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.

Официальный оппонент,
Заместитель директора по научной работе
Федеральное государственное бюджетное учреждение
науки Институт высокомолекулярных соединений
Российской академии наук,
кандидат физико-математических наук

Сергей Владимирович Ларин

«30» ноября 2020 г.

Телефон: (812) 323-39-85

E-mail: selarin@macro.ru

Адрес: 199004, г. Санкт-Петербург, Большой пр. В.О., д. 31