

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу

Сокольского Сергея Александровича

«Моделирование свойств ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц с особенностями пространственной и ориентационной архитектуры», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Актуальность темы исследования.

Диссертационная работа Сокольского Сергея Александровича посвящена исследованию свойств ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц во внешнем постоянном магнитном поле. Исследования проводятся для двух случаев: сплошной среды и многогранульных частиц, причем частицы могут быть расположены как в узлах кубической решётки, так и произвольно.

Ансамбли обездвиженных частиц, для которых характерен неелевский механизм релаксации магнитных моментов, традиционно используются в качестве моделей мягких магнитоактивных композитов. Тема исследований является актуальной, поскольку в настоящее время такие композиты успешно применяются в качестве контрастных агентов для магнитно-резонансной томографии, матриц для выращивания биологических тканей с заданной внутренней структурой, искусственных мышц для бионики и робототехники, направленного транспорта лекарственных веществ и лечения онкологических заболеваний методом магнитной гипертермии. Основная проблема при прогнозировании свойств композитов связана с тем, что большинство существующих теорий ограничиваются системами с низкой концентрацией магнитного наполнителя. При таком подходе не учитываются межчастичные диполь-дипольные взаимодействия, а также не берется во внимание пространственное расположение самих наночастиц и ориентационное распределение их осей магнитной анизотропии. Проведенные в последние годы исследования позволили учесть диполь-дипольные взаимодействия, однако разработка теории, которая бы одновременно учитывала взаимодействия между суперпарамагнитными наночастицами и их пространственное распределение в матрице, остается нерешенной и актуальной задачей.

В силу вышеизложенного **актуальность** темы диссертационной работы С. А. Сокольского не вызывает сомнений.

Краткое содержание диссертационной работы.

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и двух приложений. Во введении описана актуальность работы, сформулированы цель и задачи исследования, показаны научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, сформулированы основные положения и результаты, выносимые на защиту, представлены сведения о достоверности и апробации результатов диссертационного исследования.

Первая глава традиционно посвящена обзору литературы. В ней обсуждаются свойства различных мягких магнитоактивных материалов, рассмотрены особенности микроструктуры изучаемых композитов, разбор основных методов их моделирования.

Во второй главе представлено исследование свойств системы монодисперсных обездвиженных частиц, находящихся под действием внешнего магнитного поля.

Рассмотрены различные положения осей лёгкого намагничивания ансамбля суперпарамагнитных частиц относительного направления постоянного магнитного поля. Для проведения сравнительного анализа было рассмотрено случайное пространственное распределение частиц и распределение в узлах простой кубической решетки. При исследовании статических, магнитных и термодинамических свойств системы был использован метод разложения термодинамического потенциала – свободной энергии Гельмгольца – в классический вириальный ряд с точностью до второго коэффициента. Исследовано влияние межчастичных диполь-дипольных взаимодействий, положения осей лёгкого намагничивания, направления и интенсивности внешнего магнитного поля и особенностей пространственной и ориентационной архитектуры на магнитные свойства системы. Рассчитаны такие параметры композита как начальная магнитная восприимчивость, статическая намагниченность и теплоемкость. На примере статической намагниченности и теплоемкости проведено сравнение результатов, полученных с помощью аналитических выражений и с помощью компьютерного моделирования методом Монте-Карло.

В третьей главе исследуются свойства многогранульных частиц (МГЧ), находящихся во внешнем постоянном магнитном поле. Внутри МГЧ располагаются неподвижные суперпарамагнитные сферические гранулы, количество которых может быть чётным или нечётным, от чего принципиальным образом зависят магнитные свойства такой составной частицы. Установлена зависимость магнитного отклика МГЧ от структуры, концентрации и количества, а также диполь-дипольных взаимодействий составляющих частицу гранул. Для решения поставленной задачи использовалась разработанная во второй главе диссертации теория, которая была адаптирована для случая небольшого числа гранул. В конце главы описан алгоритм моделирования магнитного момента МГЧ методом Монте-Карло и проведена оценка погрешности численного расчета кривой намагничивания МГЧ.

Четвертая глава содержит описание принципов работы комплекса программ, с помощью которого рассчитывались магнитные свойства исследуемых в диссертации систем. Для создания программных комплексов были использованы языки программирования Fortran и C++ и система компьютерной алгебры Mathcad.

Научная новизна.

1. Разработана теоретическая модель, демонстрирующая влияние пространственной и ориентационной архитектуры, а также межчастичных диполь-дипольных взаимодействий на магнитный отклик ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц.

2. Получены аналитические выражения, позволяющие описать статическую намагниченность, магнитную восприимчивость и теплоемкость ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, расположенных как случайным образом, так и в узлах кубической решетки.

3. Разработан комплекс программ, позволяющий проводить численный расчёт магнитных характеристик ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, находящихся во внешнем магнитном поле и с учётом их пространственного распределения.

Обоснованность научных результатов подтверждается материалами публикаций, выполненных автором. По теме диссертации автором опубликовано 5 работ в рецензируемых научных журналах и входящих в международные базы цитирования Web of Science и Scopus. Зарегистрированы 2 программы для ЭВМ в Роспатенте.

Теоретическая значимость.

Численные решения и аналитические формулы, позволяющие описать влияние пространственной и ориентационной структуры на магнитные и термодинамические свойства ансамблей однодоменных обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, применимые как к случаям сплошной среды, так и к МГЧ с ограниченным числом составляющих их гранул.

Практическая значимость.

1. Использование разработанного комплекса программ для оценка магнитных характеристик композитных материалов.
2. Использование теоретических данных для предсказания поведения новых магнитоактивных материалов с заданными физическими свойствами.

Апробация работы.

Все положения диссертационной работы докладывались и обсуждались автором на 7 всероссийских и международных конференциях. Результаты, вынесенные на защиту, изложены в 16 публикациях, среди которых 5 статей в рецензируемых научных журналах, определенных ВАК РФ, Аттестационным советом УрФУ и входящих в базы данных Web of Science и Scopus, 2 свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ, 3 статьи в сборниках научных трудов, а также 6 тезисов докладов на международных и всероссийских научных конференциях.

Достоверность.

Достоверность результатов диссертационной работы подтверждается использованием классических численных методов и апробированных статистико-термодинамических методов, согласованностью теоретических результатов с данными компьютерного моделирования.

Замечания по диссертационной работе.

К сожалению, текст диссертации не лишен досадных опечаток. Например, на стр. 45 вместо « $\sigma \gg 0$ » должно быть указано « $\sigma \gg 1$ », или на стр. 69 написано «энергия Зеймана» вместо «энергия Зеемана». Часть математических формул некорректно набрана, например, выражения (2.4.39) и (2.4.40) под интегралом содержат выражения вида « $\sqrt{1-t^2}^3$ », которые стоило бы записать как « $(1-t^2)^{3/2}$ ». В самом начале второй главы для единичных векторов используется специальный символ – *циркумфлекс*, который далее в тексте часто пропускается. В оформлении списка литературы также присутствуют опечатки и неточности. Например, при оформлении источников [28, 30-32, 47, 48, 54, 111-118] вместо инициалов авторов указаны их полные имена, а в [33] пропущены точки после инициалов.

Есть вопросы и замечания, касающиеся содержания диссертационной работы.

1. В первой главе обсуждаются композитные материалы на основе изотропных жидкостей и полимерных матриц. Однако без какого-либо внимания остаются композиты на основе жидкокристаллических матриц, которые, по сути, представляют промежуточное состояние между изотропной жидкостью и полимерным расплавом. Более того рассматриваемая во второй главе модель обездвиженных суперпарамагнитных частиц с фиксированными направлениями осей легкого намагничивания напоминает модель ферронематика – коллоидной суспензии анизометричных ферро- или ферриматгнитных частиц в нематическом жидком кристалле. На мой взгляд стоило бы сравнить предложенную в диссертации модель с известными моделями ферронематиков.

2. Во второй главе рассматриваются обездвиженные частицы, расположенные в узлах простой кубической решетки. Существует ли пример или аналог таких систем в реальности?

3. Во второй главе много внимания уделено зависимости свободной энергии системы от параметра Ланжевена и параметра анизотропии в случае параллельной и перпендикулярной ориентации осей легкого намагничивания к направлению внешнего магнитного поля. К сожалению, аналогичные результаты отсутствуют для промежуточных значений углов ориентации осей легкого намагничивания к направлению магнитного поля.

4. На стр. 64 говорится о применимости модели для умеренно концентрированных систем. При этом не совсем ясно какие конкретно концентрации частиц при этом подразумеваются.

5. Особенностью третьей главы является адаптация методов статистической механики к анализу систем с малым количеством частиц. Необходимо пояснить на сколько справедливо использовать эти методы, поскольку рассматриваемые системы нельзя назвать термодинамическими или статистическими в силу малого числа гранул, составляющих МГЧ.

6. В третьей главе используется разложение свободной энергии, ограниченное лишь вторым вириальным коэффициентом. В то же время в диссертации рассматриваются МГЧ с распределениями гранул, близкими к плотноупакованной структуре. На сколько оправдано использование такого разложения?

7. В параграфе 3.4. Обсуждается магнитный отклик МГЧ. Здесь стоило бы пояснить, какие межчастичные взаимодействия диссертант считает сильными, а какие слабыми.

8. На рис. 3.4.2 для 7 гранул и параметра $\lambda_e = 3$ представлен, на мой взгляд, примечательный результат. Моделирование методом Монте-Карло лучше описывается одночастичной функцией Ланжевена, чем предложенной теорией, однако в диссертации отсутствует какое-либо пояснение или комментарий по этому поводу.

9. На рис. 3.4.4 для 7 гранул и параметра $\lambda_e = 3$ обе теоретические кривые относительно сильно отклоняются от результатов моделирования, однако описание этого момента также отсутствует в диссертации.

10. На стр. 88 утверждается: «Для всех графиков можно отметить общую тенденцию: в слабых и умеренных полях увеличение числа гранул приводит к увеличению намагниченности МГЧ. Исключением из правила является случай МГЧ с 7 гранулами». На мой взгляд, такая формулировка является не совсем удачной, так как на рис. 3.4.8 рассматриваются всего три разных значения числа гранул, и указанная тенденция не является столь очевидной.

11. В параграфе 3.5. обсуждается оценка погрешности и используется обозначения для результатов компьютерного моделирования, вошедших в итоговую выборку, в виде латинских букв $M_1, \dots, M_i, \dots, M_L$, где $L = 250$ тыс. Такое обозначение, на мой взгляд, также является не совсем удачным, так как этой же буквой обозначается намагниченность МГЧ M , включая и намагниченность одночастичной теории Ланжевена $M_L(\alpha)$.

Общая оценка диссертационной работы.

Диссертационная работа Сокольского С.А. «Моделирование свойств ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц с особенностями пространственной и ориентационной архитектуры» является самостоятельной и законченной научно-квалификационной работой, в которой содержатся новые актуальные

результаты исследования в области математического моделирования и анализа пространственной и ориентационной архитектуры ансамблей обездвиженных суперпарамагнитных частиц.

Отмеченные выше замечания не снижают общей высокой оценки диссертационной работы.

Считаю, что диссертационная работа Сокольского Сергея Александровича «Моделирование свойств ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц с особенностями пространственной и ориентационной архитектуры» выполнена на высоком научном уровне и удовлетворяет п. 9 Положения о присуждении учёных степеней в УрФУ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Официальный оппонент:

Доктор физико-математических наук, доцент
профессор кафедры физики фазовых переходов,

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Пермский государственный национальный исследовательский университет».

Контактные данные: Тел.: +7 (342) 2-396-690, e-mail: petrovda@bk.ru

Адрес места работы: 614068 Россия, г. Пермь, ул. Букирева, д.15, ФГАОУ ВО «Пермский государственный национальный исследовательский университет»

Петров Данил Александрович



(подпись)

05.06.2025 г.

(дата)

