

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 решетки, так и произвольно.

При теоретическом описании свойств феррокомпозита, как правило, используется модель обездвиженных дипольных твердых сфер, в которых реакция на магнитное поле возникает благодаря суперпарамагнитному вращению магнитных моментов внутри частиц. Несмотря на то, что известные теории, моделирующие динамический отклик феррокомпозита зачастую ограничиваются слабоконцентрированными системами, в которых не учитываются межчастичные диполь-дипольные взаимодействия, экспериментальные данные свидетельствуют о том, что подобные взаимодействия значительно влияют на статические и динамические свойства ансамблей дипольных частиц. Существует огромное количество методов синтеза феррокомпозитов, позволяющих получить как анизотропное (цепочечное, плоскостное), так и изотропное пространственное распределение частиц в образце. Тем не менее разработка теории, которая бы учитывала пространственное распределение обездвиженных суперпарамагнитных наночастиц в системе, все еще остается сложной задачей.

В силу вышеизложенного, актуальность темы диссертационной работы Сокольского С.А. 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: обзор литературы, посвящённой исследованию свойств различных мягких магнитоактивных материалов, включая анализ особенностей их микроструктуры и рассмотрение основных методов моделирования. На основании проведённого обзора сделан вывод, что физические свойства и поведение данных материалов в значительной мере определяются внутренней структурой магнитного наполнителя.

Вторая глава: исследование свойств системы монодисперсных обездвиженных частиц, находящихся под воздействием внешнего магнитного поля. В рамках работы проанализировано влияние межчастичных диполь-дипольных взаимодействий, положения осей легкого намагничивания, направления и интенсивности внешнего магнитного поля, а также особенностей пространственной и ориентационной архитектуры системы на такие магнитные характеристики, как начальная магнитная восприимчивость, статическая намагничённость и теплоемкость.

Третья глава: исследование свойств системы, представляющей собой многогранульную частицу (МГЧ), внутри которой расположены неподвижные суперпарамагнитные сферические гранулы, размещённые в узлах простой кубической решётки и находящиеся под воздействием постоянного внешнего магнитного поля. Проведена адаптация теоретических моделей и аналитических выражений, полученных во второй главе для описания статической намагничённости большого ансамбля неподвижных суперпарамагнитных наночастиц в узлах кубической решётки, для вычисления магнитного отклика МГЧ с ограниченным числом гранул и схожей архитектурой.

Четвёртая глава: Описание принципов функционирования программного комплекса, предназначенного для расчёта магнитных свойств систем взаимодействующих обездвиженных суперпарамагнитных частиц. При реализации комплекса учтены параметры интенсивности внешнего магнитного поля, особенности пространственной и ориентационной архитектуры системы, а также положения осей легкого намагничивания.

Научная новизна

1. Разработана математическая модель, демонстрирующая влияние пространственной и ориентационной архитектуры, а также межчастичных диполь-дипольных взаимодействий, положений осей лёгкого намагничивания, а также направления и интенсивности внешнего магнитного поля на магнитный отклик ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц. 2. Получены аналитические выражения, прогнозирующие значения намагниченности, магнитной восприимчивости и теплоёмкости ансамблей однодоменных обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц для случаев сплошной среды и многогранульной частицы, содержащей ограниченное число гранул.

3. Рассмотрен вопрос применения теории, разработанной для сплошных сред при описании магнитных свойств многогранульной частицы, содержащей ограниченное число гранул.

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 выражения, описывающие влияние пространственной и ориентационной архитектуры на различные магнитные и термодинамические свойства ансамблей однодоменных обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц для случаев сплошной среды и многогранульной частицы, содержащей ограниченное число гранул, в зависимости от режимных параметров.

Практическая значимость

1. Численная оценка магнитных характеристик ансамблей взаимодействующих частиц с использованием разработанного программного комплекса, позволяющая моделировать влияние межчастичных взаимодействий, архитектурных особенностей и внешних условий на магнитные свойства системы.

2. Возможность применения полученных теоретических данных и моделирования для синтеза новых магнитоактивных материалов с заданными характеристиками, что способствует оптимизации их свойств для различных технологических и медицинских приложений.

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 форумах.

Достоверность

Достоверность результатов диссертационной работы подтверждается использованием апробированных статистико-термодинамических методов исследования, классических численных методов, математической строгостью получения аналитических выражений, согласованностью теоретических результатов с данными компьютерных экспериментов и успешным тестированием разработанных программных комплексов на модельных задачах, исследуемых в более ранних работах других авторов.

Замечания по диссертационной работе

1. Глава 1 включает параграфы 1.1, в котором описаны особенности микроструктуры магнитоактивных материалов, упор в нем сделан на технологии синтеза и экспериментальные работы, параграф 1.2., посвященный взаимодействию магнитных частиц, параграф 1.3, в котором приведены методы компьютерного моделирования, далее следуют выводы по главе. Не хватает параграфа, в котором были бы приведены существующие теоретические подходы, методы компьютерного моделирования, использованные другими авторами, описаны их особенности и недостатки, которые бы восполняла диссертационная работа.

2. Почему в расчетах была принята система с $N = 25\ 141\ 257$ частицами, если из таблицы 2.1 следует, что при изменении числа частиц от 504 057 до 25 141 257 значение элементов γ_{pq} не изменяется?

3. На некоторых графиках, вставленных в виде картинок, например, рисунок 2.6.4, обозначения трудно читаемы.

4. Не всегда приведенные в диссертации зависимости, например, приведенные в параграфе 2.6.4. Теплоемкость рисунки 2.6.5., 2.6.6 сопровождаются необходимыми выводами, комментарии к ним носят описательный характер.

5. Желательно более подробно показать ограничения предложенной модели, особенно для случаев сильных межчастичных взаимодействий и высоких концентраций.

6. Очень не хватает сравнения полученных результатов моделирования, хотя бы качественного, с известными данными экспериментов.

7. В главе 4 в описании программ и алгоритмов следовало бы привести ссылки на конкретные формулы из предыдущих разделов, которые использовались в расчетах. Из главы не совсем ясно как проводились расчеты в разработанных программах.

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
декан естественно-научного факультета,

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Юго-Западный государственный университет».

Контактные данные: Тел.: +7(4712) 22-25-54 , e-mail: r-piter@yandex.ru

Адрес места работы: 305040 Россия, г. Курск, ул. 50 лет Октября, д. 94,
ФГБОУ ВО «Юго-Западный государственный университет»

Ряполов Петр Алексеевич

(подпись)



Подпись Ряполова П. А.
удостоверяю
Специалист по кадрам

А. А. Чекотова