

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.

Актуальность исследования обусловлена широким применением современных композитных материалов в области медицинской диагностики, биотехнологий, робототехники и фармацевтики. Основной научной проблемой является прогнозирование физических свойств данных композитов, что осложняется ограничениями существующих теоретических моделей, которые преимущественно рассматривают системы с низкой концентрацией магнитных наполнителей. Такие модели игнорируют межчастичные диполь-дипольные взаимодействия, а также не учитывают пространственное расположение наночастиц и их ориентационное распределение относительно осей магнитной анизотропии. В последние годы проведённые исследования позволили включить в модели диполь-дипольные взаимодействия; однако разработка комплексной теории, которая одновременно учитывала бы взаимодействия между суперпарамагнитными наночастицами и их пространственную организацию внутри матрицы, остаётся нерешённой актуальной 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.

В первой главе проведен обзор литературы, посвященной исследованию свойств различных мягких магнитоактивных материалов, рассмотрены особенности микроструктуры изучаемых композитов, разобраны основные методы их моделирования.

Во второй главе исследованы свойства системы монодисперсных обездвиженных частиц, находящихся под действием внешнего магнитного поля. Рассмотрены различные положения осей легкого намагничивания относительно направления постоянного магнитного поля. При исследовании статических, магнитных и термодинамических свойств системы был использован метод разложения свободной энергии Гельмгольца в классический вириальный ряд с точностью до второго коэффициента. Изучено влияние межчастичных диполь-дипольных взаимодействий, положения осей легкого намагничивания, направления и интенсивности внешнего магнитного поля, особенностей пространственной и ориентационной архитектуры на магнитные свойства системы, такие как начальная магнитная восприимчивость, статическая намагниченность и теплоемкость. Исследована зависимость магнитного отклика системы от пространственной и ориентационной структуры, формирующейся в ансамблях частиц за счет межчастичного диполь-дипольного взаимодействия их магнитных моментов.

В третьей главе проведено исследование свойств системы, представляющей собой многогранульную частицу (МГЧ), внутри которой располагаются неподвижные суперпарамагнитные сферические гранулы, размещенные в узлах простой кубической решетки и находящиеся под воздействием постоянного внешнего магнитного поля. Проведена адаптация теории и аналитических выражений, полученных во второй главе и описывающих статическую намагниченность большого ансамбля неподвижных суперпарамагнитных наночастиц, расположенных в узлах простой кубической решетки, для вычисления магнитного отклика МГЧ с небольшим количеством гранул и схожей архитектурой. Исследована зависимость магнитного отклика многогранульной частицы от

ориентационной структуры, формирующейся в ансамблях частиц за счет межчастичного диполь-дипольного взаимодействия их магнитных моментов, а также от концентрации и количества гранул в частице. Описан алгоритм моделирования магнитного момента МГЧ методом Монте-Карло, проведена оценка погрешности численного расчета кривой намагничивания МГЧ.

В четвертой главе изложены принципы работы комплекса программ, вычисляющего различные магнитные параметры систем взаимодействующих обездвиженных суперпарамагнитных частиц с учетом интенсивности внешнего магнитного поля, особенностей пространственной и ориентационной архитектуры системы, а также положения осей легкого намагничивания. Описаны алгоритмы работы комплекса программ, визуализирующего многогранульные частицы с конечным количеством гранул и позволяющего моделировать их магнитный отклик. Для создания программных комплексов была использована система компьютерной алгебры Mathcad и языки программирования Fortran и C++.

Научная новизна

1. Разработана новая теория, описывающая влияние пространственной и ориентационной архитектуры, а также межчастичных диполь-дипольных взаимодействий на магнитный отклик ансамбля обездвиженных суперпарамагнитных частиц.

2. Получены аналитические выражения, предсказывающие статическую намагниченность, магнитную восприимчивость и теплоемкость ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, расположенных как случайным образом, так и в узлах кубической решетки. При этом аналитические формулы учитывают вариации ориентации осей легкого намагничивания частиц.

3. Полученные аналитические формулы статической намагниченности ансамблей обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц адаптированы для моделирования магнитных свойств многогранульных частиц, содержащих ограниченное число гранул.

4. Создан программный комплекс, обеспечивающий визуализацию многогранульных частиц с конечным числом гранул и позволяющий моделировать их магнитный отклик.

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

Полученные численные решения и аналитические выражения, описывающие влияние пространственной и ориентационной архитектуры на магнитные и термодинамические свойства ансамблей однодоменных обездвиженных взаимодействующих суперпарамагнитных частиц для случаев сплошной среды и многогранульной частицы, содержащей ограниченное число гранул, вносят весомый вклад в развитие фундаментальной науки и могут стать основой для будущих исследований в данной области.

Практическая значимость

Разработанный комплекс программ позволяет провести численную оценку магнитных параметров ансамблей взаимодействующих суперпарамагнитных частиц, что может быть полезно при прогнозировании свойств магнитоактивных композитов, а полученные теоретические результаты применимы для задач синтеза новых материалов с заданными характеристиками.

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. На рисунке 2.2.4 (стр. 28) магнитные моменты почти всех частиц (кроме одной) выровнены вдоль направления магнитного поля. Возможно, было бы нагляднее изобразить данные векторы в различных направлениях, чтобы у читателя не возникали вопросы о причинах их изначальной сонаправленности.
2. Для обозначения разных величин используются одни и те же символы. Так «x» обозначает координату и диаметр магнитного ядра частицы, а «h» обозначает единичный вектор направления магнитного поля и вытянутость цилиндра, ограничивающего узлы кубической решетки.
3. В описании к рисунку 2.6.4 на странице 59 указано, что для случайного распределения рост начальной восприимчивости при смене положения от перпендикулярного к параллельному происходит резко. Однако из графиков видно, что резкий рост магнитной восприимчивости не наблюдается при $\sigma = 2$.
4. На рисунках 3.5.1 (стр. 91) и 3.5.2 (стр. 92) было бы правильнее указать единицы «тыс.» или добавить множитель « 10^3 ».

На мой взгляд, необходимо также указать положительные аспекты диссертационной работы:

1. Диссертация представляет собой лаконичный, понятный, удобным образом структурированный научный труд. Автором объяснена мотивация исследования, проведен подробный обзор литературы по тематике диссертации, выполнена значительная работа по преобразованию математических выражений и написанию компьютерных программ.
2. Полученные численные результаты проанализированы и объяснены с точки зрения физики, что повышает научный уровень работы и показывает глубокое понимание автором исследуемых процессов.
3. Разработанная в пункте 2.3.2 теория согласуется с известным из литературы (работа [125] из списка) частным случаем при $\sigma = 0$. Кроме того, результаты для случая выравнивания осей легкого намагничивания под произвольным углом согласуются с результатами, полученными для

параллельной и перпендикулярной конфигураций. Все это показывает правильность и обобщенность теоретических результатов.

4. Выполнена визуализация многогранульных частиц, что улучшает восприятие конфигурации данных объектов и понимание последующих результатов.
5. Проведена оценка области применимости разработанной теории и погрешности вычислений, подробно объяснены программные алгоритмы и приведены примеры входных данных, что облегчает понимание принципов работы программ и интерпретацию результатов.

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:

Кандидат физико-математических наук,
старший научный сотрудник лаборатории физико-химической гидродинамики НИИ механики МГУ,

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова».

Контактные данные: Тел.: +7 (495) 939-59-74, e-mail: merkulovdima@mail.ru

Адрес места работы: 119192, Россия, г. Москва, Мичуринский проспект, д.1, ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»

Меркулов Дмитрий Игоревич



06.06.2025

(подпись)

(дата)

