

ВІДГУК

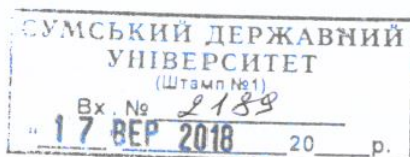
офіційного опонента на дисертаційну роботу Бадалян Анни Юріївни «**Формування та режими руху ансамблів наночастинок в рамках статистичної теорії**», поданої на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла

Дисертаційна робота присвячена побудові та аналізу теоретичних моделей, які описують індивідуальну динаміку та колективні ефекти в ансамблях наночастинок залежно від дії зовнішніх чинників.

Актуальність теми.

Вивчення фізичних властивостей та поведінки наночастинок у різних середовищах є важливим з огляду на перспективність створення на їх основі нових багатофункціональних квантових пристроїв для опто- і наноелектроніки, вимірювальної техніки, інформаційних технологій, біомедицини тощо. Незважаючи на значний доробок в галузі чисельного експерименту при вивченні різних режимів руху та формування ансамблів наночастинок, наразі відсутнє системне уявлення про фізичні явища, що виникають під час таких процесів. Крім того, залишається чимало відкритих питань щодо функціонування складних наносистем, для термодинамічних потенціалів яких не характерна властивість адитивності. Тому дисертаційна робота Бадалян А.Ю., в рамках якої розвинені феноменологічні та мікроскопічні моделі, що дозволяють описати властивості процесів руху та формування ансамблів наночастинок, є актуальною в галузі фізики твердого тіла.

Рукопис дисертаційної роботи складається із вступу, чотирьох розділів, висновків та списку використаних джерел із 178 найменувань. Обсяг дисертації становить 155 сторінок, з яких 117 сторінок - основний текст.



У першому розділі представлено літературний огляд наукових праць, де досліджували структурно-фазовий стан та поведінку наночастинок. Основна увага зосереджена на класифікації нанокластерних систем, методах формування ансамблів наночастинок, їх індивідуальному і колективному рухах у середовищах. Розглянуто магнітні властивості наночастинок на основі металів. Наголошено, що магнітні фазові переходи у нанокластерних системах, які відбуваються за механізмом першого роду, недостатньо досліджені теоретично, а фізична модель такого переходу з урахуванням властивості неадитивності вільної енергії системи взагалі відсутня.

Другий розділ присвячений формулюванню модифікованої феноменологічної моделі поведінки активних броунівських наночастинок на основі канонічної системи. Наразі відомі експерименти з металевими наночастинками, які під час нагрівання лазерним випромінюванням здійснюють активний броунівський рух, а не лише випадкові зміщення. Авторка запропонувала для аналізу типів руху таких наночастинок теоретичну модель, що уособлює загальну теорію канонічних дисипативних систем, де враховується взаємозв'язок внутрішньої енергії системи з кінетичною і повною механічною енергіями. При цьому, згідно з умовами експерименту, був розглянутий рух колоїдних наночастинок у середовищі з рідким тертям. Детально вивчена кінетика системи на основі фазових портретів за різних умов перетворення внутрішньої енергії наночастинок у механічну або кінетичну енергію руху.

На основі синергетичної системи трьох диференціальних рівнянь Лоренца побудована модель переходів між різними режимами руху наночастинок. Одержана загальна картина самоорганізації наночастинок у середовищі. Проведене дослідження показало, що введення стохастичних джерел до стандартної системи рівнянь Лоренца дозволяє описати перехід до переривчастого режиму руху наночастинок, який часто спостерігають в

експерименті. Важливим результатом цього розділу є побудова та аналіз фазової діаграми різних режимів руху наночастинок.

У третьому розділі за допомогою польових методів розвинена статистична теорія складних наносистем, для термодинамічних потенціалів яких не властива адитивність. Вона ґрунтується на методі генеруючого функціоналу, що представляє собою функціональне перетворення Лапласа узагальненої статистичної суми. При цьому поведінка ансамблю наночастинок характеризується просторово-часовою залежністю амплітуди гідродинамічної моди, середнє значення якої відповідає концентрації наночастинок.

Проведений аналіз засвідчив, що модифікація статистичного розподілу, який призводить до неадитивності термодинамічних потенціалів, не вимагає принципових змін при використанні польових методів для опису складних наносистем. Важливим результатом є одержання ефективного функціоналу (Лагранжіану) наносистеми. Вперше встановлено, що така модифікація статистичного розподілу не змінює рівняння еволюції найбільш ймовірних значень концентрації наночастинок та амплітуди її флуктуацій, тоді як ймовірність реалізації різних фазових траєкторій істотно залежить від значення параметра неадитивності.

У четвертому розділі в межах двох методичних підходів вивчені магнітні властивості наночастинок. Спочатку розглянуто мікроскопічний підхід на основі модифікованого гамільтоніана Ізінга. В рамках теорії середнього поля досліджено фазовий перехід між різними магнітними станами ансамблю наночастинок. Показано, що врахування властивості неадитивності дозволяє описати перехід між станами нанокластерних систем за режимом фазового переходу першого роду, який спостерігають у багатьох експериментах з ансамблями магнітних наночастинок.

Також розглянуто феноменологічний підхід для опису переходу між парамагнітним та магнітовпорядкованим станами наносистеми з урахуванням міжкластерної взаємодії та дії зовнішнього тиску. Важливим результатом є розраховані температурна залежність стаціонарного значення відносної намагніченості та критичне значення тиску, за якого можливий фаховий перехід.

Підсумовуючи, можна стверджувати, що у представленій дисертації одержано цілу низку нових науково-значущих результатів, зокрема: в рамках канонічного підходу для металевих колоїдних наночастинок вперше описані їх режими руху та формування ансамблів; удосконалена статистична модель, яка дозволяє дослідити поведінку ансамблю наночастинок на основі рівнянь для термодинамічних потенціалів, яким не властива адитивність; вперше встановлена залежність ймовірності реалізації різних кінетичних станів ансамблю наночастинок від параметра неадитивності; нарешті, в рамках запропонованих мікроскопічного та феноменологічного підходів розглянуто перехід (за механізмом першого роду) між різними магнітними станами ансамблю наночастинок.

Практичне значення результатів дисертаційної роботи. Одержані результати якісно пояснюють наявні експериментальні дані і носять прогнозуючий характер щодо динаміки ансамблю наночастинок у різних середовищах (зокрема вказують на ті параметри, які мають визначний вплив на властивості, рух та формування ансамблів наночастинок). Це становить інтерес як для експериментальних досліджень та практичного застосування у різних нанотехнологіях, так і подальшого розвитку теоретичних моделей.

Про достовірність результатів та ступінь обґрунтованості наукових положень і висновків свідчить застосування адекватних теоретичних моделей та використання апробованого аналітичного і чисельного

математичного апарату (рівнянь Ландау-Халатнікова, Ланжевена та Фоккера-Планка, метод стійкості Ляпунова тощо).

Апробація та повнота викладу результатів дисертації в опублікованих працях. Результати дисертаційної роботи опубліковані у 26 працях, з яких 3 статті у фахових виданнях України, 2 статті у закордонних наукових журналах (4 статті індексуються наукометричною базою даних Scopus) та 9 статей у матеріалах конференцій. Одержані результати апробовані на вітчизняних і міжнародних конференціях, за результатами яких опубліковано 12 тез доповідей.

Автореферат повністю відображає зміст дисертації.

Зауваження щодо змісту дисертаційної роботи.

1. Розділ 2: чому при дослідженні режимів руху ансамблів наночастинок не враховано неоднорідність розподілу у просторі основних параметрів системи?

2. Розділ 3: не зрозумілою є фізична інтерпретація одержаних залежностей статистичної суми і моментів спостережуваних величин.

3. Розділ 4: відсутній аналіз запропонованих моделей за використання параметричного наближення $h=0$, що становить більш практичний інтерес.

4. В межах запропонованих теоретичних моделей часто вводиться поняття «параметр порядку системи», який визначає динаміку фазових траєкторій. Однак цей параметр потребує аналізу з точки зору врахування нанорозмірності частинок, адже відомо, що існує пряма залежність «розмір-ефект».

Однак наведені вище зауваження не мають принципового характеру і не знижують наукової цінності одержаних у дисертації результатів.

Відповідність встановленим вимогам МОН України щодо кандидатських дисертацій. Вважаю, що дисертаційна робота Бадалян А.Ю. є завершеним теоретичним дослідженням, яке за актуальністю, новизною, фундаментальною і практичною значущістю одержаних результатів повністю відповідає вимогам п.п. 9, 10, 12, 13 «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України №567 від 24 липня 2013 р. (зі змінами, внесеними згідно з Постановами КМУ №656 від 19 серпня 2015р., №1159 від 30 грудня 2015р. та №567 від 27 липня 2016р.), а її авторка, Бадалян Анна Юріївна, заслуговує на присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Доктор фізико-математичних наук, професор,
професор кафедри біофізики і медичної інформатики
Київського національного університету
імені Тараса Шевченка

Ю.І. Прилуцький

ПІДПИС ЗАСВІДАЧУЮ
ВЧЕННИЙ СЕКРЕТАР
КАРАУЛЬНА Н.В.
21.09.20

