

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу

Крупянского Дмитрия Сергеевича

«Анализ структурного состояния многокомпонентных систем атомов, формируемых в компьютерных экспериментах, на основе теории графов»,
представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа Крупянского Д.С. посвящена исследованию структуры модельных многокомпонентных атомных нанокластеров. Интерес к данной проблеме вызван тем, что в последнее время большие надежды возлагаются на материалы в наноразмерном состоянии, свойства которых определяются, помимо прочего (форма, размер), особенностями атомной структуры. Однако экспериментальное изучение данных объектов, основанное на применении дифракционных методов, связано со значительными трудностями, обусловленными малыми размерами областей когерентного рассеяния. Дополнительную информацию о структуре наноразмерных систем можно получить с помощью компьютерного моделирования. Использование методов молекулярной динамики и Монте-Карло позволяет строить модели, содержащие десятки, сотни тысяч и более частиц. При этом знание их координат даёт принципиальную возможность получения любой структурной информации о рассматриваемой системе. Однако анализ этой информации представляется весьма нетривиальной задачей. Несмотря на все усилия и очевидный успех в изучении ряда таких систем, универсального подхода к решению этой проблемы до сих пор не существует. В связи с этим разработка новых подходов к исследованию структуры многокомпонентных атомных кластеров в численных экспериментах, которым посвящена работа Крупянского Д.С., является актуальной задачей.

Научная новизна диссертации заключается в разработке нового метода анализа многокомпонентных нанокластеров, основанного на выявлении в их

структуре системы локальных атомных конфигураций, представляемой в виде графа. На основе анализа значений рассмотренных автором инвариантов показана их корреляция со структурным состоянием исследуемой системы. В частности, показана взаимосвязь данных величин с потенциальной энергией системы, степенью её кристалличности и составом. Также установлено соответствие разбиения модельного кластера на области с однородной структурой, составом или концентрацией разбиению соответствующего графа на сообщества, представляющие собой группы плотно связанных вершин.

Научную и практическую ценность работы представляет возможность применения разработанного метода для выявления структурных особенностей в модельных нанокластерах. Получаемые при этом данные могут быть использованы для интерпретации и теоретического обоснования результатов компьютерного моделирования, что с учётом данных дифракционных экспериментов позволит глубже понять структуру исследуемых объектов.

Достоверность результатов, полученных в работе обеспечивается использованием надёжных и широко используемых методов компьютерного моделирования и проведением необходимого количества экспериментов для получения статистически значимых данных. Результаты работы подтверждаются теоретическими и экспериментальными данными других авторов.

Диссертация логично и просто структурирована. Работа разделена на введение, четыре главы, заключение и список литературы из 146 наименований и два приложения. Общий объём составляет 168 страниц, включая 66 рисунков и 10 таблиц.

Во введении обоснована актуальность, сформулирована цель диссертационной работы и перечислены поставленные задачи, указаны её новизна, научная и практическая важность результатов, приведены основные положения, выносимые на защиту. Описана апробация и достоверность результатов, а также личный вклад автора.

Первая глава – литературный обзор. В ней диссертант анализирует

имеющиеся на сегодняшний день представления о структуре неупорядоченных атомных систем и подходы к её анализу. Особое внимание уделено идеям, основанным на использовании теории графов.

Вторая глава диссертации посвящена описанию методики исследования структуры многокомпонентных нанокластеров атомов. Предлагаемый автором подход основан на выявлении в исследуемой системе координационных многогранников, рассматриваемых в качестве структурных элементов. Для анализа их формы предложена новая характеристика, позволяющая количественно оценить степень отличия найденного структурного элемента от аналогичного ему равновесного. Для описания структуры исследуемого объекта автор использует граф, описывающий систему соединяющихся друг с другом структурных элементов.

В третьей главе приведены результаты исследования структуры и процесса формирования кристаллических нанокластеров на основе оксида магния. Автором рассмотрены модели, содержащие различное количество кристаллитов. Результаты проведённых компьютерных экспериментов находятся в хорошем соответствии с данными, приведёнными другими авторами, что свидетельствует об адекватности исследуемых моделей. В работе показана высокая чувствительность значений инвариантов построенных графов к структурному состоянию данных объектов, а также – возможность выделения областей кристаллического порядка посредством анализа структуры сообществ данных графов. Сделан вывод о возможности применения разработанного подхода для исследования широкого класса объектов.

Четвёртая глава диссертации посвящена исследованию структуры неупорядоченных наноразмерных кластеров на основе жидкого стекла, в частности, рассмотрены кластеры, состоящие из сферических частиц состава $\text{Na}_2\text{O} \times n\text{SiO}_2$. Установлены зависимости значений инвариантов построенных графов от химического состава данных объектов, а также – влияние локального химического состава в области соприкосновения двух сферических частиц на характер их взаимодействия. Предложенный подход позволил выявить в

структуре частиц жидкого стекла, легированного кобальтом, протяжённые каналы, сформированные атомами Со и О. Сделан вывод о возможности применения разработанного метода для выявления неоднородностей структуры, состава и концентрации в моделях многокомпонентных неупорядоченных систем атомов.

В заключении сформулированы наиболее значимые результаты проведённых исследований и выводы. Список литературы содержит 146 наименований и охватывает ключевые работы по выбранному направлению.

Замечания по диссертационной работе:

- 1) В случае нанокластеров интересно было бы исследовать икосаэдрические и декаэдрические структуры как часто встречающиеся структуры реальных нанокластеров и переходы между этими структурами, а в случае кристаллического упорядочения интересным объектом являются квазикристаллы. Анализ подобных структур не приведен в работе.
- 2) Автор указывает, что достоверность полученных результатов обеспечивается использованием статистических методов, однако в тексте вопрос статистических данных и анализа освещён недостаточно подробно.
- 3) Вместо сложночитаемого выражения «интерстициальная пустота/сфера» лучше использовать устоявшийся термин «пора».

Заключение

Диссертация Крупянского Д.С., несмотря на незначительные недостатки, является законченным самостоятельным научным исследованием, посвящённым актуальной проблеме, результаты которого достаточно полно отражены в опубликованных автором печатных работах. Автореферат включает необходимые сведения о диссертации и соответствует её содержанию. Текст диссертации содержит требуемые формальные разделы, в достаточной степени иллюстрирован и даёт полное представление о проведённых исследованиях и их результатах. Выдвигаемые автором научные представления и выводы

обоснованы, их достоверность и новизна не вызывают сомнения.

В частности, необходимо отметить, что работа содержит новое научно-обоснованное решение важной проблемы – выявление особенностей структуры моделей многокомпонентных наноразмерных систем атомов.

Диссертация полностью соответствует требованиям п.9 «Положения о присуждении учёных степеней» ВАК при Минобрнауки РФ, утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., предъявляемых к диссертациям на соискание учёной степени кандидата наук, а её автор, Крупянский Дмитрий Сергеевич, заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

23.05.2016

Научный сотрудник лаборатории
моделирования и разработки новых
материалов НИТУ «МИСиС»,
кандидат физико-математических наук

Белов Максим Павлович

Почтовый адрес: 119049, Москва, Ленинский проспект, 4
Телефон: +7 (495) 638-44-69
E-mail: makspalych@gmail.com

ПОДПИСЬ
Проректор
по общим вопросам
НИТУ «МИСиС»

ЗАВЕРЯЮ
И.М. ИСАЕВ