

Министерство науки и высшего образования  
Российской Федерации  
Федеральное государственное  
бюджетное учреждение науки  
«Федеральный исследовательский центр  
Южный научный центр  
Российской академии наук»  
(ЮНЦ РАН)



пр. Чехова, 41 г. Ростов-на-Дону, 344006  
тел. (863) 266-64-26  
тел./факс (863) 266-56-77  
e-mail: ssc-ras@ssc-ras.ru

ОГРН 1036168007105 ИНН/КПП 6168053099/616301001  
25.03.22 № 17 900 -2115-248

На № \_\_\_\_\_

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр Южный научный центр Российской академии наук», доктор географических наук

С.В. Бердников

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 г.



### ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу Арефьевой Людмилы Павловны «Межфазные характеристики металлических нанокристаллов и тонких пленок на границах с вакуумом, расплавом и полярной органической жидкостью», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 - Физика конденсированного состояния

Поверхность является классическим объектом физики конденсированного состояния и с развитием нанотехнологий ее изучение приобретает первостепенное значение. Разработка теоретических методов описания и оценки межфазных свойств металлических материалов является актуальным научным направлением. Поверхностные свойства металлов и расплавов являются ведущими во многих физических и физико-химических процессах, в том числе электронной эмиссии, фазовых переходах, адгезии, адсорбции, смачивании, катализе и коррозии. Межфазные явления играют ведущую роль в таких технологических процессах как пайка, сварка, получение устойчивых дисперсных систем и качественных покрытий. Как следствие, существует необходимость разработки корректного метода расчета свойств поверхности металлов и сплавов и их размерных и концентрационных зависимостей.

В этой связи работа, направленная на изучение межфазных свойств трех-, двух- и нульмерных металлических систем, безусловно, является **актуальной**.

Диссертация, объемом 326 страниц, состоит из введения, шести глав, заключения, списка цитируемой литературы из 445 наименований и 7 приложений, и включает 175 рисунков и 27 таблиц.

Во **введении** обоснована актуальность и показана степень разработанности темы, сформулированы цель, задачи, положения, выносимые на защиту, научная новизна и практическая значимость работы, апробация результатов, личный вклад автора и публикации по теме диссертации.

В **первой главе** проведен обзор существующих методов измерения и расчета поверхностной и межфазной энергий металлов, позволяющих оценить их ориентационную, температурную и размерную зависимости на разных границах раздела фаз. Обобщены результаты расчетов и измерений поверхностной и межфазной энергий моно- и поликристаллов, наноструктур металлов разных групп на различных границах контакта, а также результаты расчетов анизотропии работы выхода электрона металлов и ее связи с анизотропией поверхностной энергии кристаллических граней.

Во **второй главе** на основании электронно-статистической теории С.Н. Задумкина с учетом современного состояния теории Томаса-Ферми получены выражения для расчета поверхностной энергии граней тонких пленок металлов и сплавов с ОЦК, ГЦК и ГПУ структурами. В том числе, выражения для расчета координаты границы Гиббса, внутреннего, внешнего и температурного вкладов в ПЭ граней, поправок, учитывающих дисперсионное взаимодействие ячеек Вигнер-Зейтца между собой и поляризацию поверхностных ионов металлов. На основании термодинамической модели получено выражение для энергии связи кристаллической решетки сплавов переходных металлов. Показано, что электронно-статистический метод расчета поверхностной энергии хорошо передает размерную, концентрационную, ориентационную и температурную зависимости поверхностной энергии тонких пленок *d*- и *f*-металлов. Также в рамках электронно-статистического метода установлены общие закономерности влияния упругой деформации на поверхностную энергию граней макрокристаллов и тонких пленок *d*-металлов.

В **третьей главе** на базе электронно-статистического метода разработана методика оценки МЭ нанокристаллов переходных металлов и ее размерной, ориентационной и температурной зависимостей на границе с расплавами. Проанализированы зависимости межфазной энергии металлических

нанокристаллов от размеров твердой фазы и толщины слоя расплава. Показано, что разработанная методика позволяет получать значения межфазной энергии металлов на границе с расплавом, находящиеся в согласии с известными экспериментальными данными для моно- и поликристаллов.

В **четвертой главе** получены выражения для оценки межфазной энергии металлических частиц и тонких пленок на границе с диэлектрическим покрытием. Рассмотрен случай полярных диэлектриков, стабилизирующих наночастицы и тонкие пленки кобальта. Показано, что наиболее эффективным стабилизатором из рассматриваемых органических диэлектриков является 1,2-этанediол. Полученные автором зависимости находятся в хорошем согласии с расчетами, выполненными другими авторами методом функционала электронной плотности и известными экспериментальными данными.

В **пятой главе** в рамках электронно-статистической теории Френкеля-Гамбоша-Задумкина установлена связь между работой выхода электрона и поверхностной энергией граней металлических кристаллов с учетом температурной зависимости. Проведены численные оценки работы выхода электрона поликристаллов IV, IIВ, переходных *d*-металлов и анизотропии поверхностной энергии аллотропных фаз актинидов с кристаллическими структурами разных сингоний.

В **шестой главе** на основе анализа равновесной формы кристалла на подложке разработана методика оценки анизотропии поверхностной и межфазной энергий на границе контакта «частица-подложка». Эффективный контактный угол, отношение межфазных энергий твердой системы оцениваются по экспериментальным данным геометрических характеристик частиц, полученных с помощью атомно-силовой микроскопии. Исследованы анизотропия поверхностной и межфазной энергий и эффективных контактных углов в системах индий-кремний, никель-кремний, медь-кремний и кобальт-кремний.

В **заключении** сформулированы основные результаты и выводы по диссертационной работе.

Обширный материал диссертации изложен последовательно, хорошим

научно-литературным языком. Текст снабжен богатым иллюстративным материалом, оформленным с использованием современных графических редакторов. Результаты представлены в основном в виде графиков и диаграмм, но также систематизированы в виде таблиц. К каждому разделу диссертации приведены промежуточные научные выводы. Следует отметить, что приведенные в тексте теоретические и экспериментальные данные и сформулированные на их основе научные положения и выводы показывают, что основная цель, заявленная соискателем – разработка на базе электронно-статистической теории металлов Френкеля-Гамбоша-Задумкина обобщенного метода определения размерной, концентрационной, температурной и ориентационной зависимостей поверхностной и межфазной энергий переходных металлов и сплавов на границах с вакуумом, расплавом, полярной диэлектрической жидкостью, а также ориентационной и температурной зависимостей работы выхода электрона; разработке экспериментального метода исследования анизотропии поверхностной и межфазной энергии, и эффективного контактного угла смачивания в твердой системе «металлсодержащая частица-подложка» – **достигнута**.

**Научная новизна** полученных результатов заключается в том, что автором разработан корректный метод численной оценки межфазной энергии и работы выхода переходных металлов и сплавов на их основе, позволяющий получать данные о размерной, концентрационной, ориентационной и температурной зависимостях данных величин. Экспериментальные данные по анизотропии межфазной энергии и эффективного контактного угла в системах металлсодержащая частица – ориентированная подложка (In-Si(111) и Ni-Si(111) в вакууме, Co-Si(100) и Cu-Si(100) стабилизированные органическими соединениями) получены **впервые**.

**Достоверность и обоснованность** полученных результатов обеспечена выбором строгой модели и корректностью математических построений, использованием в качестве исходных экспериментальных данных рекомендованных значений физических величин, полученных при помощи надежных современных методов измерений. Достоверность результатов экспериментов обусловлена использованием современных поверенных приборов

и оборудования, имеющих установленный предел отклонений, стандартных методов исследования, статистической обработкой результатов.

**Практическая значимость** состоит в развитой теории, позволяющей рассчитать значения межфазной энергии одно- и двухкомпонентных металлических систем на различных границах раздела фаз и определить ее размерную, концентрационную и температурную зависимости; установлении аналитической связи между анизотропией поверхностной энергии и работой выхода электрона металлов; разработанной методике определения эффективного контактного угла в системе металлсодержащая частица-подложка. Новые научные результаты, полученные в работе, могут представлять интерес для специалистов, занимающихся исследованием и созданием композиционных материалов, для оптимизации технологии получения металлических частиц, построении фазовых диаграмм биметаллических наносистем.

К диссертационной работе имеется ряд **замечаний**:

1) Какой физический смысл носит выражение «дисперсионное взаимодействия между ячейками Вигнера-Зейтца»?

2) В тексте работы автор использует понятия «макрокристалл», «нанокристалл», «поликристалл», «металлический кристалл», однако детального пояснения не приводится. Это может ввести в заблуждение, так как не понятно, например, кристалл толщиной 300 нм в понимании автора это «нанокристалл» или «макрокристалл»? Что такое в понимании автора понятие «монокристалл толщиной 2 нм»?

3) Из текста работы не понятно, можно ли распространить полученные результат на аморфные структуры?

4) Предложенный автором «оригинальный метод оценки анизотропии ПЭ, МЭ и эффективного контактного угла, основанный на измерении геометрических характеристик частиц на подложке с помощью АСМ» корректнее называть «...методикой...». Из текста работы не понятно, в каком режиме работы АСМ приводились исследования, что может существенно влиять на правильность восприятия и интерпретации представленных результатов.

5) В тексте диссертационной работы имеются опечатки, текстовые и

графические недочёты. В отдельно взятых случаях предложения сложны для понимания правильного смысла, например, «Зависимость РВЭ от температуры нелинейна, монотонна и мала».

Высказанные замечания носят частый характер, не затрагивают основное содержание и выводы, и не снижают общей положительной оценки работы.

**Содержание автореферата** соответствует содержанию диссертации. Материалы диссертации достаточно полно отражены в опубликованных работах. Результаты работы опубликованы 60 статьях в российских и зарубежных изданиях, в том числе в 17 статьях в журналах, входящих в международные реферативные базы данных и системы цитирования, 13 статьях в журналах, входящих в Перечень ВАК РФ.

### **Заключение**

Диссертационная работа Арефьевой Людмилы Павловны представляет собой законченную квалификационную научно-исследовательскую работу на актуальную тему в области физики межфазных явлений и технологии наноструктур, в которой решены важные задачи.

Автореферат и опубликованные труды автора отражают основные положения диссертационной работы, а результаты исследований прошли широкую апробацию на отечественных и международных конференциях.

Диссертационная работа Л.П. Арефьевой на тему «Межфазные характеристики металлических нанокристаллов и тонких пленок на границах с вакуумом, расплавом и полярной органической жидкостью» по научному уровню и значимости полученных результатов соответствует научной специальности ВАК РФ 1.3.8 – Физика конденсированного состояния требованиям пунктов 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», предъявляемым к докторским диссертациям, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2019 года № 842 (редакция от 11.09.2021 года). Данная диссертационная работа может быть отмечена как научно-квалификационная работа, вносящая существенный вклад в развитие представлений о межфазных явлениях на границах раздела фаз.

На основании изложенного следует заключить, что автор диссертационной работы Арефьева Людмила Павловна, заслуживает присуждения ей искомой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 -Физика конденсированного состояния.

Отзыв подготовлен доктором физико-математических наук (специальность 1.3.8 – Физика конденсированного состояния), заведующим лабораторией наноразмерных активных сред и материалов, доктором физико-математических наук Павленко Анатолием Владимировичем (344006, Ростов-на-Дону, пр. Чехова, 41).

Отзыв обсужден и утвержден на заседании отдела физики, химии, информатики ЮНЦ РАН, протокол заседания № 2 от 18 марта 2022 г.

*Согласен на обработку моих персональных данных:*

Заведующий лабораторией наноразмерных  
активных сред и материалов ЮНЦ РАН,  
ведущий научный сотрудник,  
доктор физико-математических наук  
телефон: +7 905 430 50 06  
электронная почта: [tolik\\_260686@mail.ru](mailto:tolik_260686@mail.ru)



Павленко А.В

Ученый секретарь ЮНЦ РАН  
Заведующая лабораторией гидробиологии ЮНЦ РАН,  
ведущий научный сотрудник,  
кандидат биологических наук

Булышева Н.И.

344006, г. Ростов-на-Дону, пр. Чехова, 41.  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
«Федеральный исследовательский центр  
Южный научный центр Российской академии наук»  
телефон: (863) 250-98-13;  
электронная почта: [ssc-ras@ssc-ras.ru](mailto:ssc-ras@ssc-ras.ru)  
сайт ЮНЦ РАН: <http://www.ssc-ras.ru/>



«15» марта 2022 г.