

«УТВЕРЖДАЮ»

Директор
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Институт вычислительного
моделирования СО РАН
(ИВМ СО РАН)
Член-корреспондент РАН
д. ф.-м. н., профессор
В. А. Шайдуров



2014 г.

ОТЗЫВ

на диссертацию Ершова Александра Евгеньевича
**«Коллоидные структуры с произвольной морфологией:
синтез, оптические свойства и оптодинамические явления»**,
представленную к защите на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.05 — оптика.

Изучение взаимодействия металлических наночастиц с оптическим излучением является одной из важных задач нанооплазмоники. Исследование таких процессов актуально для широкого спектра задач, связанных с локальным лазерным возбуждением плазмон-поляритона в нановолноводах из цепочек наночастиц, а также при спектрально-селективном воздействии импульсного лазерного излучения на резонансные домены многочастичных коллоидных агрегатов. Одним из объектов изучения нанофотоники являются коллоидные кристаллы. Разработка технологий синтеза кристаллических структур, состоящих из малых коллоидных частиц, является одной из важных и перспективных задач. В области нанофотоники к числу нерешенных проблем относится отсутствие полных представлений о доминирующих механизмах фотохромных и нелинейно-оптических эффектов.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы. Во Введении обоснована актуальность диссертационной работы и показана практическая значимость полученных результатов, сформулированы цели и задачи работы, аргументирована научная новизна исследований, представлены выносимые на защиту положения.

В главе 1 представлен обзор литературы по теме исследования. Освещены методы получения коллоидных кристаллов, использующие способность частиц к самоорганизации. Рассмотрены публикации, в которых

обсуждается спектральные свойства неупорядоченных плазмонно-резонансных агрегатов. Проанализированы работы по взаимодействию оптического излучения с нанокомпозитными материалами, а также по нелинейно-оптическим эффектам в таких материалах. Приведен обзор публикаций, имеющих отношение к задачам практического применения плазмонно-резонансных нанокolloидов.

В главе 2 исследуется процесс получения двумерных коллоидных кристаллов из малых частиц методом подвижного мениска. Для описания этого процесса была разработана численная модель, учитывающая ван-дер-ваальсово и упругое взаимодействия между частицами, а также частиц с подложкой; капиллярные силы, действующие на частицы, не полностью погруженные в жидкость; возникновение потока жидкости в области искривленного мениска вблизи подложки. Модель основана на методе броуновской динамики, который реализует молекулярно-динамический подход. Данная модель позволяет воспроизвести реальные условия синтеза кристалла, а также сделать выводы о дефектности полученной структуры. Исследованы зависимости дефектности от различных параметров системы (концентрации частиц, угла наклона подложки, краевого угла «жидкость-твердая поверхность», динамической вязкости жидкости, коэффициента поверхностного натяжения, коэффициента межчастичного трения, толщины полимерного адсорбционного слоя частиц, ускорения свободного падения). Показано, что доминирующим фактором в методе подвижного мениска является конвективный поток жидкости, образующийся из-за более интенсивного испарения с искривленного мениска вблизи подложки, приносящий новые частицы в область формирования упорядоченной структуры. Капиллярные же силы носят вспомогательный характер, способствуя процессу осаждения и упорядочения частиц. В работе исследованы оптические свойства формирующейся на подложке структуры в процессе синтеза. Выполнены эксперименты, показывающие, что разработанная модель воспроизводит основные морфологические свойства синтезируемых структур. Полученные экспериментальные результаты позволяют утверждать, что синтезированная упорядоченная структура из субмикронных сферических частиц полиметилметакрилата обладает избирательным отражением и пропусканием света.

Глава 3 посвящена исследованию спектральных свойств полидисперсных неупорядоченных плазмонно-резонансных агрегатов. В этой главе использована аналитическая модель поглощения оптического излучения агрегатами полидисперсных плазмонно-резонансных наночастиц, позволяющая наиболее точно рассчитать спектр плазмонного поглощения вне решеточных агрегатов. В отличие от ранних более простых моделей, данная модель является распределенной, позволяет адекватно рассчитывать оптические характеристики агрегатов частиц, находящихся на малых расстояниях друг от друга, в частности, воспроизводить длинноволновое крыло спектра плазмонного поглощения. Данная модель является квазистатической, что в случае компактных агрегатов (с размерами много

меньшими длинны волны излучения) не приводит к существенным искажениям результатов. С помощью данной модели произведены расчеты спектров экстинкции простейших типов агрегатов, указаны основные особенности влияния фактора соотношения размера частиц (наибольшее внимание уделено протяженности длинноволнового крыла спектра). Представлены аналогичные результаты для многочастичных агрегатов при различной функции дисперсии межчастичного зазора и различном количестве частиц, входящих в агрегат. Выявлена важность учета фактора межчастичного зазора.

В главе 4 исследовано взаимодействие импульсного лазерного излучения различной длительности, длины волны и интенсивности с многочастичными агрегатами и их простейшими резонансными доменами плазмонно-резонансных Ag наночастиц. Для описания этого процесса разработана оптодинамическая модель, описывающая механизм взаимодействия импульсного лазерного излучения с дисперсными системами. По сравнению с аналогичными моделями, достоинством данной модели является возможность расчета оптодинамических эффектов в агрегатах с произвольным числом частиц и размером каждой частицы. Модель учитывает термодинамические, оптические, физико-химические, механические процессы, вызванные воздействием лазерного излучения, изменение температуры электронной и ионной компоненты каждой частицы и теплообмен между ними. Впервые учтено изменение константы электронной релаксации материала частиц при нагреве и плавлении. Модель описывает уменьшение упругих свойств адсорбционного слоя частиц вследствие разрушения молекулярных связей под действием высоких температур. Расчет дипольных моментов и межчастичных оптических сил выполняется методом связанных диполей с поправкой на учет вклада высших мультиполей. Исследован эффект изменения оптических свойств наночастиц серебра, меди и золота при плавлении.

Исследованы пороговые величины (интенсивность излучения, температура частиц) процесса статической модификации простейших резонансных доменов в широком диапазоне длительностей импульса. Введен количественный фактор, показывающий степень изменения спектра экстинкции в процессе фотомодификации. Представлена зависимость фактора модификации димера при различных значениях среднего размера частиц, степени полидисперсности и межчастичного зазора. Показан результат воздействия лазерного импульса на многочастичные агрегаты при различной степени полидисперсности и длине волны лазерного излучения. Выявлены основные особенности такого воздействия. Результаты качественно подтверждены известными экспериментальными данными.

В Заключение приведены основные результаты исследований.

Разработана физическая модель процесса формирования 2D кристаллов из малых коллоидных частиц методом подвижного мениска, с помощью которой исследованы закономерности процесса осаждения наночастиц на подложку, выявлены основные факторы такого процесса, найдены параметры

системы, позволяющие получить наименее дефектные кристаллы. На примере коллоидных агрегатов показано влияние фактора полидисперсности размера частиц на спектры этих агрегатов. Разработана модель лазерной фотомодификации многочастичных агрегатов и их резонансных доменов. С помощью этой модели получены сведения об основных закономерностях фотомодификации коллоидных агрегатов в зависимости от длительности лазерного импульса. Выявлены основные механизмы процесса фотомодификации. Продemonстрировано резкое ухудшение резонансных свойств наночастиц из основных материалов наноплазмоники (Ag, Au, Cu) при их плавлении.

Приведенные результаты диссертационной работы содержат новые научные результаты, что подтверждено публикациями в рецензируемых журналах из списка ВАК.

Замечания по диссертации:

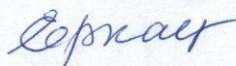
1. При описании параметра дефектности периодической структуры (раздел 2.2) говорится о необходимости отдельного учета вклада границы периодической структуры, но не указан конкретный способ, примененный в работе.
2. Возникает вопрос корректности применения метода связанных диполей в главе 4 для расчета оптических характеристик частиц, находящихся очень близко друг к другу (межчастичный зазор менее 1 нм).
3. Текст диссертации сверстан небрежно.

Данные замечания не влияют на качество полученных в диссертационной работе результатов.

Считаем, что объем диссертационной работы, достоверность и значимость полученных результатов удовлетворяют требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор — Ершов Александр Евгеньевич, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.05 — оптика.

Выступление Ершова А. Е. заслушано на расширенном заседании отдела Вычислительной физики ИВМ СО РАН, протокол №7 от 30 октября 2014 года. Отзыв рассмотрен и одобрен на этом же семинаре в присутствии 5 докторов и 1 кандидата наук по специальности диссертационной работы.

Руководитель семинара и заведующий
отделом Вычислительной физики ИВМ
СО РАН доктор физ.-мат. наук, профессор



Н. В. Еркаев

Отзыв составил главный научный
сотрудник ИВМ СО РАН, доктор физ.-
мат. наук, профессор



Н. Я. Шапарев

Секретарь семинара, научный сотрудник,
к. т. н.



А. А. Кадочников

Публикации д.ф.-м.н., профессора, гнс ИВМ СО РАН Шапарева Н. Я за 2009-2014 гг.

1. N. Ya. Shaparev "Absorption of continuum radiation in a resonant expanding gaseous sphere", J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys., 2014, v.47, p.22540.
2. A. P. Gavriluk, N.Ya Shaparev "The combined effect of optical laser and microwave radiations on the metal surface", Chin. Phys. B, 2014, v. 23, No. 2, p. 025205.
3. N. Ya. Shaparev " The spectrum of resonant laser radiation to decelerate ions in an expanding ultracold plasma" Laser Phys. Lett. 2013, v.10, p.085501.
4. Н. Я. Шапарев «Уменьшение поглощения резонансного излучения в расширяющемся газе», ДАН, 2013, т.448, №4, с. 403.
5. Гаврилюк А.П., Шапарев Н.Я. «Образование плазмы на поверхности металла при совместном действии лазерного и СВЧ излучений». Квантовая электроника. 2013, т.43, №10, с.943-949.
6. N.I Kosarev, N.Y.Shaparev, Scattering and absorption of resonant radiation in expanding sphere// J. Phys. B: At Mol. Opt. Phys., 2012, v. 45 ,Iss.16 , pp. 165003 (5p) .
7. N.I Kosarev, N.Y.Shaparev, Imprisonment dynamics of resonance radiation in gases.// J. Phys. B: At Mol. Opt. Phys., 2011, v. 44, Iss.44 , pp. 105402 (5p).
8. A.P. Gavriluk, I.L. Isaev, S.V. Karpov, I.V.Krasnov, N.Ya. Shaparev. "Brownian Dynamic of Laser Cooling and Crystallization of Electron-ion Plasma", Phys.Rev.E, 2009, v.80, issue 5, p. 056404 (6p.).
9. А.П.Гаврилюк, И.В.Краснов, Н.Я.Шапарев. "Моделирование и диагностика ультрахолодной лазерной плазмы", Вычислительные технологии, 2009, №6, с. 29-33.



Шапарев Н. Я.

Верно:

Ученый секретарь ИВМ СО РАН

к.ф.-м.н



Вяткин А. В.