

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.479.14,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ «УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И
ТЕХНОЛОГИЙ» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО
ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО ДИССЕРТАЦИИ
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело N _____
решение диссертационного совета от 26.12.2025 г. № 18

О присуждении Бабичевой Рите Исмагиловне, гражданке РФ, учёной степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Границы раздела в нанокристаллических материалах: молекулярно-динамическое моделирование» по научной специальности 2.6.6. Нанотехнологии и наноматериалы принята к защите 16.09.2025 г., протокол № 13, диссертационным советом 24.2.479.14, созданным на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, 450076, г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32, созданного приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 1977/нк от 18.10.2023 г.

Соискатель **Бабичева Рита Исмагиловна**, 17.10.1985 года рождения, в 2008 году окончила государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Уфимский государственный авиационный технический университет» по специальности «Физика металлов» с присвоением квалификации «Инженер-физик».

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по научной специальности 01.04.07 - Физика конденсированного состояния на тему «Фазовые переходы и дилатация сплава Ti-49,8ат.%Ni в различных структурных состояниях» защитила в 2016 г. в диссертационном совете Д 002.080.03, созданном на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт проблем сверхпластичности металлов» Российской академии наук.

Работает в должности старшего научного сотрудника научно-исследовательской лаборатории "Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях" Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий».

Диссертация выполнена в научно-исследовательской лаборатории "Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях" федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский университет науки и технологий» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный консультант — доктор физико-математических наук Дмитриев Сергей Владимирович, заведующий лабораторией физики твердого тела обособленного структурного подразделения «Институт физики молекул и

кристаллов» Федерального государственного бюджетного научного учреждения «Уфимский федеральный исследовательский центр» Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

Маслов Михаил Михайлович, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой физики твердого тела и наносистем Института лазерных и плазменных технологий Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ» (НИЯУ МИФИ), г. Москва;

Полетаев Геннадий Михайлович, доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник научного управления Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова» (АлтГТУ), г. Барнаул;

Маркидонов Артем Владимирович, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой информатики и вычислительной техники им. Буторина В.К. Кузбасского гуманитарно-педагогического института Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский государственный университет» (КемГУ), г. Новокузнецк,

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова» Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН), г. Москва, **в своем положительном отзыве**, подписанном Савиным Александром Васильевичем д.ф.-м.н., ведущим научным сотрудником лаборатории физики и механики полимеров и утвержденном Ивановым Вячеславом Сергеевичем д.ф.-м.н., исполняющим обязанности директора, указали, что «Диссертация Бабичевой Р.И. на соискание ученой степени доктора физико-математических наук является завершённой научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, которые можно квалифицировать как научное достижение в области исследования наноматериалов. Кроме того, ею изложены научно обоснованные рекомендации для разработки нанокристаллических (НК) сплавов различных систем с улучшенными прочностными свойствами и уникальными функциональными свойствами, что несомненно способствует развитию нанотехнологий. Тема и содержание диссертационного исследования Бабичевой Р.И. на тему «Границы раздела в нанокристаллических материалах: молекулярно-динамическое моделирование» соответствуют научной специальности 2.6.6 — Нанотехнологии и наноматериалы. Работа отвечает всем требованиям к докторским диссертациям, изложенным в пп. 9-11, 13, 14 постановления Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842 «О порядке присуждения ученых степеней». Соискатель заслуживает присуждения ей ученой степени доктора физико-математических наук по специальности — 2.6.6. Нанотехнологии и наноматериалы».

Соискатель имеет 76 научных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 47 работ в рецензируемых научных изданиях из перечня изданий ВАК

РФ и/или входящих в базы данных Web of Science и/или Scopus (из них 35 в журналах первого и второго квартиля). Среди них 9 работ опубликовано в журналах из перечня изданий ВАК РФ по специальности 2.6.6 — Нанотехнологии и наноматериалы. Общий объем публикаций — 25 п.л., авторский вклад — 20 п.л. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации; соискатель ссылается на авторов и источники заимствования.

Наиболее значимые работы:

1) Сугоняко, И.С., Бабичева, Р.И., Моркина, А.Ю., Д.В. Таров, Д.В., Дмитриев, С.В. Моделирование движения краевых дислокаций в алюминии при высоких сдвигающих напряжениях методом молекулярной динамики (2025) Физика твердого тела, 67 (8) 1411-1418. Методом молекулярной динамики в работе исследуется движение краевых дислокаций в монокристалле алюминия при различных сдвигающих напряжениях и температурах. Рассчитана энергия дефекта упаковки и оценена частота колебаний линии дислокации. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными и могут быть использованы при интерпретации электропластического эффекта. 2) Jarlöv, A., Ji, W., Babicheva, R., Tian, Y., Hu, Z., Seet, H.L., Tan, L., Liu, F., Liu, Y., Nai, M.L.S., Ramamurty, U., Zhou, K. Tailoring short-range order and dislocation evolution in Cr–Co–Ni medium-entropy alloys: A molecular dynamics study (2024) Materials and Design, 240, 112840. Молекулярная динамика используется для изучения упорядочения в сплавах системы Cr–Co–Ni. В работе показано, что упорядочение атомов с формированием кластеров можно контролировать путем изменения химического состава. 3) Morkina, A.Y., Babicheva, R.I., Korznikova, E.A., Enikeev, N.A., Edalati, K., Dmitriev, S.V. A Molecular Dynamics Simulation to Shed Light on the Mechanical Alloying of an Al–Zr Alloy Induced by Severe Plastic Deformation (2023) Metals, 13(9), 1595. Моделирование проводится для изучения механического растворения труднорастворимых элементов, в частности Zr, в границах зерен Al при сдвиге с гидростатическим давлением. Доказано, что дислокационное скольжение при интенсивной пластической деформации вносит больший вклад в растворение атомов Zr, чем зернограничное проскальзывание. 4) Babicheva, R., Jarlöv, A., Zheng, H., Dmitriev, S., Korznikova, E., Ling Sharon Nai, M., Ramamurty, U., Zhou, K. Effect of short-range ordering and grain boundary segregation on shear deformation of CoCrFeNi high-entropy alloys with Al addition (2022) Computational Materials Science, 215, 111762. Молекулярная динамика и метод Монте-Карло применены для анализа влияния ближнего порядка и сегрегаций по границам зерен в НК ВЭСх CoCrFeNi и Al(8 ат%)-CoCrFeNi. Обнаружено, что сегрегация атомов Al в границы способствует их стабилизации препятствуя пластической деформации путем зернограничного проскальзывания и миграции границ зерен. Вычисление энергии дефекта упаковки кластеров Fe₃Al, формирующихся при релаксации сплава с Al, показало, что ближний порядок может приводить к росту предела текучести. 5) Jarlöv, A., Ji, W., Zhu, Z., Tian, Y., Babicheva, R., An, R., Seet, H.L., Ling Sharon Nai, M., Zhou, K. Molecular dynamics study on the strengthening mechanisms of Cr–Fe–Co–Ni high-entropy alloys based on the generalized stacking fault energy (2022) Journal of Alloys and Compounds, 905, 164137. С помощью моделирования методом молекулярной

динамики найдена корреляция между энергией дефекта упаковки и механизмами упрочнения ВЭСов системы Cr–Fe–Co–Ni при их одноосном растяжении. Показано, что увеличение содержания Cr и Fe приводит к уменьшению энергии, в то время как с ростом концентрации Co и Ni наблюдается противоположная тенденция. 6) Han, C., Babicheva, R., Chua, J.D.Q., Ramamurty, U., Tor, S.B., Sun, C.-N., Zhou, K. Microstructure and mechanical properties of (TiB+TiC)/Ti composites fabricated in situ via selective laser melting of Ti and B₄C powders (2020) *Additive Manufacturing*, 36, 101466. В работе экспериментально изучается микроструктура и механические свойства композитов (TiB+TiC)/Ti, полученных методом селективного лазерного спекания. Молекулярная динамика применена для анализа влияния формирующихся частиц на прочность композитов. Было показано, что высокая прочность полученных структур обусловлена преимущественно дисперсионным и зернограницным упрочнением. 7) Бабичева, Р.И., Семенов, А.С., Дмитриев, С.В., Жоу, К. Влияние зернограницных сегрегаций на температуры мартенситного превращения в бикристаллах NiTi (2019) *Письма о материалах*, 9 (2), 162-167. Методом молекулярной динамики анализируется влияние сегрегации атомов Ti или Ni вдоль границы зерен наклона $\Sigma 25$ на температуры мартенситных превращений. Показано, что она может значительно понижать температуру фазового перехода за счет аккомодации сегрегирующими атомами упругих деформаций в границах зерен. 8) Babicheva, R.I., Bachurin, D.V., Dmitriev, S.V., Zhang, Y., Kok, S.W., Bai, L., Zhou, K. Elastic moduli of nanocrystalline binary Al alloys with Fe, Co, Ti, Mg and Pb alloying elements (2016) *Philosophical Magazine*, 96(15), 1598-1612. В работе с помощью моделирования методом молекулярной динамики определяются модули упругости НК бинарных сплавов Al-X (X может быть Fe, Co, Ti, Mg или Pb), в которых атомы X расположены в границах зерен. Установлено, что жесткость сплавов возрастает с уменьшением атомного радиуса элемента X. 9) Babicheva, R.I., Dmitriev, S.V., Zhang, Y., Kok, S.W., Srikanth, N., Liu, B., Zhou, K. Effect of grain boundary segregations of Fe, Co, Cu, Ti, Mg and Pb on small plastic deformation of nanocrystalline Al (2015) *Computational Materials Science*, 98, 410-416. В работе с помощью моделирования методами молекулярной динамики и молекулярной статистики исследуется влияние сегрегации атомов различных примесных элементов в границы зерен на прочность НК бинарных сплавов Al. Показано, что примесные атомы меньшего размера чем Al способны упрочнять структуру сплавов.

На диссертацию и автореферат поступили **отзывы**:

1. Ведущей организации Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова» Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН). Замечания: 1) В работе большое внимание уделено зернограницным (ЗГ) сегрегациям. В частности, изучается их влияние на прочность бинарных сплавов Al. Но слабо освещен вопрос возможности получения подобных сегрегаций на практике. Интересно бы было услышать мнение автора по данному вопросу; 2) По влиянию размера примесного элемента в ГЗ Al на прочность границы, рассмотренное в главе 2. Показано, что с увеличением размера сегрегирующего элемента способность к упрочнению

снижается. Однако здесь не учитывается химическое взаимодействие примесного и матричного атома. Каков вклад химической составляющей? 3) В пакете прикладных программ ЛАММПС, которым соискатель активно пользовалась, имеется банк данных с межатомными потенциалами, причем, для некоторых веществ имеется возможность выбора потенциалов. На каком основании проводился выбор потенциалов для проведенных в диссертации расчетов? 4) В главе 5 рассматривается влияние 3Г сегрегаций Ni и Ti на мартенситные превращения в NiTi. Показано, что в результате формирования в ГЗ прослойки аморфной фазы (в случае Ni) и тонкой пленки Ti, фазовое превращение осуществляется в разных температурных интервалах. Известно, что помимо аморфной прослойки и тонкой пленки, образованной одним типом атома, сегрегирующие атомы могут формировать другие виды структур, так называемые «complexions». Было бы интересно узнать, как такие сегрегации влияют на мартенситное превращение.

2. Оппонента Маслова М.М., д.ф.-м.н., доцента, заведующего кафедрой физики твердого тела и наносистем института лазерных и плазменных технологий ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ», г. Москва (оппонент). Замечания: 1) В главе 2 слабо прослеживается связь с экспериментальными работами. Сравнение результатов моделирования с фактами, установленными в эксперименте, хотя бы на качественном уровне усилило бы работу. Необходимо было привести больше экспериментальных данных и ссылок на соответствующие источники в подтверждение достоверности обнаруженных закономерностей. 2) По второй главе диссертации сделан вывод о влиянии размера сегрегирующих атомов на потенциал охрупчивания. Однако никаких выводов о влиянии химического потенциала сегрегирующих элементов на данный параметр не делается. Возникает вопрос: можно ли руководствоваться лишь размерным фактором при обсуждении влияния тех или иных сегрегаций на прочность границ зерен. 3) В диссертации автором, в основном, рассмотрены когерентные границы раздела фаз, в то время как для практики также важно изучить влияние некогерентности границ на их свойства. Например, для ВЭСов остался вопрос о важности учета некогерентности границ раздела на их свойства. 4) Замечание по оформлению работы. В конце диссертации приводится список таблиц и рисунков, хотя соответствующие названия уже фигурируют в основном содержании диссертации. В связи с этим не совсем понятно зачем они были включены в работу.

3. Оппонента Полетаева Г.М., д.ф.-м.н., профессора, ведущего научного сотрудника научного управления ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова», г. Барнаул (оппонент). Замечания: 1) В названии работы автор отмечает лишь один метод атомистического моделирования, МД, однако в работе также часто применяется метод Монте Карло. При этом в первой главе дано подробное описание только первого метода. Возможно,

в названии диссертации следовало бы обобщить эти два метода используя термин «атомистическое моделирование» и посвятить методу Монте Карло отдельный подраздел в первой главе. 2) Большое внимание в работе уделяется ЗГ сегрегациям в различных НК материалах. Рассматривается их влияние на прочность и механизмы деформации сплавов при фиксированной толщине слоя сегрегации по ГЗ. Однако было бы интересно знать, как поведет себя рассматриваемый материал при других толщинах, т. е. изучить эффект толщины ГЗ. 3) Как известно, данные, полученные из первых принципов, считаются более точными, чем в случае применения МД. И поэтому для расчета энергии ЗГ сегрегации и потенциала охрупчивания для различных элементов в ГЗ Al (Глава 2) было бы правильнее применить первопринципные расчеты.

4. Оппонента Маркидонова А.В., д.ф.-м.н., доцента, заведующего кафедрой информатики и вычислительной техники им. Буторина В.К. Кузбасского гуманитарно-педагогического института ФГБОУ ВО «Кемеровский государственный университет», г. Новокузнецк (оппонент). Замечания: 1) Автор обнаружил, что упрочнение границ Al другими замещающими элементами в границах можно наблюдать лишь для атомов, имеющих близкий или меньший радиус чем у Al. Возникает вопрос — будет ли эта закономерность работать, если, к примеру, мы будем рассматривать металл, имеющий не ГЦК структуру как у Al, а ОЦК или ГПУ? Можно ли обобщить этот результат для всех металлов? 2) Некоторые элементы, включая Co, рассмотренные в качестве добавочного компонента во второй главе, имеют очень низкую растворимость в Al. Тем не менее в диссертационной работе концентрация таких элементов в Al может быть значительно выше максимально возможной. Возможно ли наблюдать столь высокую концентрацию этих элементов в действительности? 3) Считается, что в случае моделирования многокомпонентных систем вроде ВЭСов, многочастичные потенциалы, полученные по методу погруженного атома, используемые также в данной работе, могут оказаться недостаточно надежными. В настоящее время для таких систем исследователи все чаще прибегают к помощи потенциалов, полученных с применением машинного обучения. Чем обусловлен выбор межатомных потенциалов для исследования ВЭСов в данной диссертации? Может ли выбор потенциала сказаться на полученных результатах и сделанных выводах? 4) Во второй главе рассматривается модель НК сплава Al-X, имеющего средний размер зерен 90 Å. Несмотря на большой объем проведенного исследования в главе не обсуждается влияние размера зерен на полученные результаты. Подобное исследование, если оно было бы проведено, смотрелось бы вполне уместно, особенно при изучении пластической деформации НК Al. Как предположительно изменяются кривые «напряжение-деформация» на рис.2.15 при других размерах зерен? 5) В пятой главе при исследовании влияния ГЗ на мартенситные превращения автор на рисунках 5.5, 5.7 и 5.8 приводит

температурные зависимости потенциальной энергии, фазового состава и размеров бикристаллов. При этом моделируется нагрев бикристалла, содержащего ГЗ кручения, на интервале температур от 50 до 450 К. Но на рисунке 5.9 вычисление сдвигового напряжения в бикристалле прекращается после достижения $= 320$ К. Почему дальнейшие вычисления не проводятся? С чем это связано? 6) В работе содержатся погрешности в тексте: «...осуществляется визуализация атомной структуры и проводится фазовый.» (стр. 193), «...имеют тенденцию приводят к вязкоподобному...» (стр. 214), «...В бикристалле Si без начечки...» (стр. 215) и прочие.

5. Казанцевой Н.В., д.ф.-м.н., главного научного сотрудника лаборатории «Аддитивных технологий» Федерального государственного учреждения Института физики металлов им. М.Н. Михеева Уральского отделения Российской Академии наук. В отзыве отмечено, что «диссертационное исследование Р.И. Бабичевой имеет высокую актуальность», а полученные соискателем «научные результаты являются новыми и не противоречат существующим физическим законам». Замечания: 1) Во Введении не рассмотрены другие методы моделирования деформационного поведения наноматериалов, нет сравнения, показывающего преимущество выбранного метода исследования. 2) Чем был обусловлен выбор материалов, почему были взяты именно эти материалы, насколько они показательны для поставленной цели исследования? 3) В работе представлено исследование модельных: бинарных систем алюминия с Fe, Co, Ti, Mg, Pb. Чем был обоснован выбор именно этих сплавов? Как согласуются полученные в работе результаты с известными промышленными сплавами алюминия (Al-Mg, Al-Cu-Mg, Al-Mg-Si)? 4) Научная НОВИЗНа, П5. «...стабильность дефектов упаковки (ДУ) определяется энергией их образования....». Поясните пожалуйста, что имеется в виду? Энергия образования ДУ отвечает за ширину дефекта упаковки, что значит стабильный и нестабильный дефект упаковки? 5) В упорядоченных системах образуются сверхструктурные дефекты упаковки с энергией образования сверхструктурных дефектов упаковки (SSF), и эта энергия отличается от энергии образования дефекта упаковки неупорядоченного твердого раствора (SF). Также не очень понятно, что значит энергия обобщенного дефекта упаковки для разных типов упорядочения? 6) Одной из проблем ограничения применения высоко-энтропийных сплавов (ВЭС) является их низкая пластичность. Какой вклад в решение этой проблемы вносит проведенное в работе исследование?

6. Кащенко М.П., д.ф.-м.н., профессора, заведующего кафедрой общей физики социально экономического института ФГБОУ ВО «Уральский государственный лесотехнический университет». В отзыве обоснована актуальность проведенных исследований, а также отмечено присутствие в работе множества новых научных результатов со списком наиболее интересных по мнению рецензента. Замечания отсутствуют.

7. Бунакова А.А., к.ф.-м.н., ученого секретаря Института физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН. В отзыве подчеркивается высокая актуальность работы, а также отмечается, что достоверность полученных результатов подтверждается использованием хорошо протестированных физических моделей и их сравнением с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными. Замечание: «В

качестве небольшого замечания можно отметить некоторую обособленность последней главы диссертации, где рассматриваются тонкие пленки на основе кремния, в то время как в остальных главах акцент делается на объемных нанокристаллических структурах.» (цитата из отзыва на автореферат).

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации определяется их высокой компетентностью в области компьютерного моделирования, материаловедения и наноматериалов, наличием публикаций в соответствующей области знания и способностью определить научную и практическую ценность диссертации.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработаны:

- подходы для улучшения прочностных свойств нанокристаллических (НК) бинарных сплавов алюминия с размером зерен, не превышающим 10 нм, путем химической модификации их границ зерен (ГЗ);
- рекомендации по выбору химического состава высокоэнтропийных сплавов (ВЭСов), при котором соответствующие НК структуры демонстрируют повышенную прочность;

предложены:

- оригинальные научные концепции, объясняющие взаимосвязь структуры и химического состава ГЗ со свойствами исследованных НК материалов;
- новые идеи улучшения свойств конструкционных НК ВЭСов, например, химическая модификация ГЗ, когда сегрегирующие в границы атомы улучшают их когезию, а связанное с этим процессом повышение доли элементов, стабилизирующих матрицу внутри зерен, таких как Та, может способствовать росту напряжения течения материала;

доказано:

- существование неизвестной ранее четкой зависимости прочности ГЗ НК сплавов алюминия от размера сегрегирующего в границу примесного элемента среди рассмотренных сегрегантов (Fe, Co, Ti, Mg, Pb);
- что снижение концентрации элемента, атомы которого имеют тенденцию к формированию химической связи в ВЭСах, приводит к образованию более дискретных и крупных кластеров этого элемента;
- что зернограничные (ЗГ) сегрегации в NiTi снижают температуру прямого мартенситного превращения (ПМП) из-за аккомодации упругой деформации в границах сегрегирующими атомами, а в отсутствии сегрегаций, ПМП наступает при более низких температурах в образцах с ГЗ кручения, по сравнению с образцами с ГЗ наклона, что обусловлено низкими напряжениями от винтовых дислокаций в ГЗ наклона.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказано с использованием современных методов атомистического моделирования, что инженерия границ зерен, путем контроля структуры и химического состава границ зерен, может улучшить свойства объемных металлических наноматериалов;

применительно к проблематике диссертации результативно использован комплекс существующих базовых методов и принципов атомистического моделирования и математического анализа полученных данных для описания структуры и свойств рассматриваемых моделей материалов, в том числе, путем комбинации молекулярной динамики и метода Монте-Карло;

изложены идеи и гипотезы, расширяющие известные знания о влиянии сетки границ зерен на формирование ЗГ сегрегаций в алюминиевых и многокомпонентных НК сплавах, а также об особенностях деформации НК структур при наличии неоднородности по химическому составу, вызванной присутствием таких границ;

изучено влияние границ раздела, зернограницных сегрегаций и неоднородности по химическому составу на механизмы пластической деформации, особенности фазовых превращений, а также на прочностные свойства НК материалов;

раскрыты принципы дополнительного упрочнения НК бинарных сплавов алюминия путем повышения когезии границ, достигаемого введением ЗГ сегрегаций атомов определенных металлов, а также связь структуры ГЗ с критическими температурами мартенситных превращений в НК сплавах NiTi с эффектом памяти формы;

проведена модернизация подходов моделирования многокомпонентных сплавов путем комбинации молекулярной динамики с методом Монте-Карло, что позволяет учесть диффузию атомов и получить более реалистичную равновесную структуру исследованных наноматериалов.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработаны методы дополнительного повышения прочности алюминиевых сплавов и ВЭСов за счет формирования упрочняющих структуру ЗГ сегрегаций и когерентных частиц, имеющих повышенную энергию дефекта упаковки;

определены перспективы создания новых и улучшения имеющихся конструкционных и функциональных материалов с НК структурой для их успешного применения на практике за счет управления структурой и химическим составом ГЗ;

создана теоретическая модель для описания взаимосвязи структуры ГЗ и температур фазовых превращений в сплавах с эффектом памяти формы на основе NiTi, которую важно учитывать при разработке биоматериалов, например, для медицинских имплантов, используемых в узких температурных интервалах;

представлены рекомендации по выбору состава сплавов и химической модификации ГЗ рассмотренных систем для улучшения их свойств и возможности применения в промышленности в качестве конструкционных материалов.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что:

компьютерные модели построены на проверяемых фактах, известных устоявшихся принципах материаловедения, и не противоречат имеющимся на сегодняшний день опубликованным экспериментальным и теоретическим работам;

идея базируется на обобщении передового опыта изучения влияния ГЗ на свойства НК объёмных материалов и основных постулатах инженерии ГЗ;

использована математическая модель для учёта диффузии атомов — метод Монте-Карло. Дополнение молекулярной динамики этим подходом позволило

получить более реалистичные равновесные структуры, что особенно важно при моделировании многокомпонентных систем;

установлено качественное совпадение полученных соискателем результатов с имеющимися литературными данными по рассмотренной тематике. Результаты работы не противоречат основным принципам материаловедения и закономерностям физики наноматериалов, кроме того, большинство из них прошли строгую оценку на этапе рецензирования в российских и зарубежных журналах высокого рейтинга, что несомненно повышает уровень их надёжности.

Личный вклад соискателя состоит в участии на всех фазах выполнения диссертационной работы. Ею была обозначена цель исследований и определены задачи для ее достижения. Для их успешного решения соискатель самостоятельно проводила моделирование с применением молекулярной динамики и метода Монте-Карло и в дальнейшем анализировала полученные результаты, делая соответствующие выводы. Кроме того, она активно работала над подготовкой научных статей и докладов для выступлений на различных конференциях, посвящённых теме диссертационной работы.

В ходе защиты диссертационной работы критические замечания не высказывались. Преимущественно звучали вопросы уточняющего и конкретизирующего характера. Соискатель Бабичева Р.И. достаточно уверенно отвечала на адресованные ей вопросы и приводила собственную аргументацию.

На заседании 26.12.2025 г. диссертационный совет принял решение присудить Бабичевой Рите Исмагиловне ученую степень доктора физико-математических наук по специальности 2.6.6. Нанотехнологии и наноматериалы за разработку теоретических положений по оптимизации прочностных и функциональных свойств НК материалов конструкционного и специального назначения, что имеет важное значение для развития промышленности в стране, а потому, в совокупности, они могут быть квалифицированы как научное достижение.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 15 человек, из них 7 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из них 17 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 14, против – 0, недействительных бюллетеней – 1.

Председатель диссертационного совета

Ученый секретарь
диссертационного совета



Валиев Руслан Зуфарович

Бобрук Елена Владимировна

26 декабря 2025 года