

Отзыв на автореферат диссертации Бабичевой Риты Исмагиловны

«Границы раздела в нанокристаллических материалах: молекулярно-динамическое моделирование»,

представленной на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук по специальности
2.6.6. Нанотехнологии и наноматериалы

Наноматериалы имеют большой потенциал, благодаря своим уникальным свойствам, обусловленным размерным фактором. Большую роль в наноструктурах играют дефектные границы зерен или фазовые границы. Границы зерен в наноразмерных материалах составляют половину всего объема, поэтому их влияние на деформационное поведение наноматериалов оказывается существенным. Введение наноразмерных частиц в материал приводит к формированию межфазных границ, возникающих между включением и матрицей. Метод молекулярной динамики позволяет проводить симуляцию взаимодействий между атомами различных химических элементов и выявлять отклик системы на подобные изменения. Таким образом, этот метод позволяет проводить исследования дефектов в кристаллах, моделировать фазовые переходы и неравновесные состояния, в том числе и в наноразмерных системах. С этой точки зрения, диссертационное исследование Р.И. Бабичевой имеет высокую актуальность. В работе показана эффективность использования атомистического моделирования для изучения структуры и свойств наноматериалов, необходимых для создания новых изделий для медицины и нанoeлектроники.

Р.И. Бабичевой было выполнено перспективное теоретическое исследование, направленное на получение высококачественных наноматериалов. Наиболее интересными являются результаты по влиянию химического состава наноразмерных высокоэнтروпийных сплавов на процессы атомного упорядочения. Р.И. Бабичевой было проведено моделирование методом молекулярной динамики процесса упрочнения высокоэнтропийного сплава CrFeCoNi , основанное на энергии дефектов упаковки. А также определено влияние ближнего порядка и зерно-границных сегрегаций на сдвиговые деформации высокоэнтропийного сплава CrFeCoNi с добавками алюминия. Определена структура границ зерен, размер примесей, а также энтальпия смешения компонент сплава, которые определяют возможность формирования зерно-границных сегрегаций и интерметаллидных частиц, существенно повышающих механические свойства наноразмерных высокоэнтропийных сплавов. При моделировании атомных сегрегаций в наноразмерных сплавах с памятью формы, NiTi , методом молекулярной динамики, Р.И. Бабичевой установлено, что температуры мартенситных превращений в наноразмерных сплавах на основе NiTi сильно зависят от химического состава и геометрии границ зерен. На основании проведенных расчетов, Р.И. Бабичевой показано, что присутствие в структуре зерно-границных сегрегаций атомов Ti , и особенно Ni , существенно подавляют мартенситное превращение, при этом в отсутствии сегрегаций, фазовый переход в NiTi с границами зерен кручения наступает значительно позднее, чем в образце с границами зерен нанаклона.

ВХОД. № 4469-13
«08» 12. 2015г.

Полученные Р.И. Бабичевой научные результаты являются новыми и не противоречат существующим физическим законам.

По автореферату имеются следующие замечания:

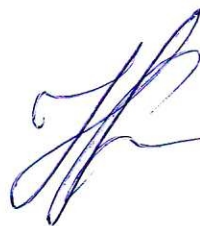
1. Во Введении не рассмотрены другие методы моделирования деформационного поведения наноматериалов, нет сравнения, показывающего преимущество выбранного метода исследования.
2. Чем был обусловлен выбор материалов, почему были взяты именно эти материалы, насколько они показательны для поставленной цели 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?

Данные замечания не влияют на значимость и актуальность диссертационной работы. Работа выполнена с использованием современных методов исследования. Основные результаты работы апробированы на российских и международных конференциях, защищаемые положения достаточно полно отражены в научных публикациях. Р.И. Бабичева является соавтором 47 научных статей, опубликованных в рецензируемых научных журналах. Представленная работа соответствует паспорту специальности 2.6.6. «Нанотехнологии и наноматериалы»: П.1. Методы получения наноматериалов, композитных структур, структур пониженной размерности, приборов и интегральных устройств на их основе. П.2. Структурные, морфологические и механические наноматериалов и композитных структур на их основе. П. 4. Атомные кластеры и наноструктуры на поверхности. Границы раздела в наноматериалах и композитных структурах. П. 9. Моделирование свойств, физических явлений и технологических процессов в наноматериалах и композитных структурах.

На основании изложенного считаю, что диссертационная работа Р.И. Бабичевой «Границы раздела в нанокристаллических материалах: молекулярно-динамическое моделирование» соответствует всем требованиям ВАК, предъявляемым к докторским диссертациям, а автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 2.6.6. Нанотехнологии и наноматериалы.

Доктор физ.-мат. наук, шифр специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния, главный научный сотрудник лаборатории «Аддитивных технологий» Федерального государственного учреждения Института физики металлов им. М.Н. Михеева, Уральского отделения Российской Академии наук

«24» «ноября» 2025 г.



Казанцева Наталия Васильевна

620108, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, 18

телефон: +7 (343) 374-02-30

E-mail: kazantseva@imp.uran.ru

Я, Казанцева Наталия Васильевна, даю согласие на обработку моих персональных данных, необходимых для оформления аттестационного дела по защите докторской диссертации Бабичевой Риты Исмагиловны.

