



«УТВЕРЖДАЮ»

И.о. директора ФИЦ ХФ РАН, д.ф.-м.н.,

/ Иванов В. С.

«2» 12 2025 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

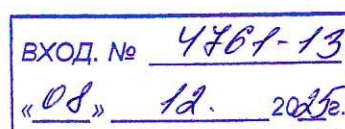
Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова» Российской академии наук на диссертационную работу **Бабичевой Риты Исмагиловны** на тему «Границы раздела в нанокристаллических материалах: молекулярно-динамическое моделирование», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 2.6.6 – Нанотехнологии и наноматериалы.

Работа выполнена в ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий».

Научный консультант: д.ф.-м.н., профессор Дмитриев С.В.

1. Актуальность темы диссертационного исследования

В настоящее время одним из национальных приоритетов научно-технологического и экономического развития Российской Федерации является повышение надежности и эффективности использования материалов. Пути реализации этой программы включают разработку новых материалов, отличающихся уникальными, а главное необходимыми для их успешного применения свойствами, и усовершенствование имеющихся путем изменения их структуры. Кристаллические материалы, имеющие мелкозернистую структуру и потому, по сравнению с крупнокристаллическими аналогами, отличающиеся повышенной прочностью, находят все большее применение на практике. Тем не менее, большой спектр современных вызовов в области машиностроения, электроники и нанотехнологий требует решения



нестандартных задач, выходящих за рамки возможностей обычных конструкционных материалов, и даже мелкозернистых.

Главными объектами исследований диссертационной работы соискателя выступают нанокристаллические (НК) сплавы различных систем, каждая из которых характеризуется отличительными особенностями, например, легкостью, жаропрочностью или функциональными свойствами. Помимо химического состава, в таких структурах границы раздела играют особенно важную роль, т.к. они напрямую определяют свойства НК материалов.

Возможность определения оптимальных структурных характеристик для достижения желаемых механических и функциональных свойств НК систем на практике, определяет высокую **актуальность** исследования наноматериалов на атомарном уровне и оправдывает **цель** диссертационной работы. А использование соискателем методов компьютерного моделирования весьма обосновано, т.к. они позволяют эффективно предсказывать макроскопические свойства материалов, не прибегая к дорогостоящим или труднореализуемым экспериментам.

2. Обоснованность и достоверность результатов

Обоснованность результатов, полученных соискателем в ходе работы над диссертацией, вытекает из их непротиворечивости имеющимся литературным данным и известным экспериментальным результатам. Результаты исследований имеют высокую степень достоверности, поскольку движение и взаимодействие атомов при моделировании методом молекулярной динамики описываются фундаментальной системой уравнений движения Ньютона, а в случае метода Монте-Карло вероятность процесса описывается математической моделью с использованием генератора случайных величин. Для моделирования применяется весьма популярный программный пакет LAMMPS, надежность которого подтверждена множеством публикаций и согласием получаемых результатов с экспериментальными данными. Пакет содержит необходимые для моделирования, апробированные межатомные потенциалы. Все представленные в диссертации результаты опубликованы в ведущих высокорейтинговых рецензируемых профильных научных журналах. Кроме того, материалы исследований успешно представлены на передовых российских и международных конференциях и симпозиумах, что свидетельствует об их достаточной апробации.

3. Оценка содержания диссертации и научная новизна

Диссертационная работа изложена на 286 страницах, список литературы содержит 289 источников. Основная часть работы состоит из введения и 6 глав.

Во **введении**, согласно требованиям ВАК, приведены цель, решаемые задачи, актуальность темы и ее теоретическая и практическая значимость, научная новизна, основные положения, личный вклад автора и апробация полученных результатов.

В **первой главе** проведен обзор имеющихся в литературе публикаций по рассматриваемой тематике. Описаны структурные особенности, а также отличительные свойства НК материалов, изучаемых в работе. Показано, что молекулярная динамика выступает мощным средством изучения структуры и свойств границ раздела наноматериалов. Приводятся примеры использования этого метода для исследования структуры и свойств ряда алюминиевых сплавов, высокоэнтропийных сплавов (ВЭСов), сплавов с эффектом памяти формы (ЭПФ) и др. Акцентируется внимание на наличии большого фронта работ в области инженерии границ зерен НК материалов ввиду большого разнообразия существующих материалов и методов воздействия на них. Список литературы достаточно длинный, он позволяет получить полное представление об НК материалах и демонстрирует целесообразность и важность проделанной соискателем работы.

Результаты проведенных соискателем исследований описаны на достаточно высоком научном уровне поэтапно в последующих главах в рамках решаемых задач.

В частности, **вторая глава** диссертационной работы посвящена исследованию влияния структуры границ зерен на механические свойства НК бинарных сплавов алюминия на моделях в форме бикристаллов и поликристаллических образцах. Большое внимание в этом разделе уделено зернограничным (ЗГ) сегрегациям различных элементов и их вкладу в упрочнение границ зерен, а также механизмам деформации в НК сплавов Al.

В разделе можно выделить **новые** интересные результаты, к примеру, автором показано, что примесные атомы замещения небольшого размера (меньше Al) упрочняют границы зерен, в отличие от элементов большего размера. Однако в работе не рассматривается химическая природа такого явления.

В главе также затронут вопрос механического растворения ЗГ сегрегаций в

процессе интенсивной пластической деформации. **Впервые** с использованием молекулярной динамики показано, что дислокационное скольжение вносит больший вклад в перераспределение атомов нежели ЗГ проскальзывание.

В последующих двух главах изучаются многокомпонентные системы, в частности, в **третьей главе** рассмотрены ВЭСы с ГЦК матрицей (сплавы Кантора), а в **четвертой главе** — жаропрочные ВЭСы, имеющие ОЦК структуру. В разделах изучается формирование ЗГ сегрегаций и когерентных частиц, а также особенности эволюции дефектной структуры в моделях, состоящих из двух или более нанозерн, в зависимости от состава сплава и типа границ зерен в исходной структуре. В данных главах было правильным использовать метод Монте-Карло, т.к. распределение атомов в многокомпонентных сплавах играет очень важную роль, а молекулярная динамика не способна моделировать диффузию из-за ограничений по времени моделирования. Среди **новых** результатов, вероятнее всего, наиболее интересным и важным здесь выступает обнаружение явной зависимости упорядочения с образованием кластеров от концентрации элементов в формируемых частицах. Кроме того, на основе измерения энергии дефекта упаковки соискатель приводит модель определения химического состава сплава с повышенной прочностью.

В **пятой главе** автор отвечает на вопрос влияния структуры ГЗ на фазовое превращение в НК NiTi. Показано как тип ГЗ и ее химический состав может сместить точку перехода аустенитной фазы в мартенситную. **Впервые** с помощью молекулярной динамики было показано, что помимо типа элемента, структура формирующейся прослойки ЗГ сегрегации существенно влияет на точку начала мартенситного превращения.

В **шестой главе** соискатель изучает особенности деформации НК структур на основе Si. В первой части рассматривается чистый Si, в то время как вторая часть главы посвящена изучению влияния межфазной границы между Si и аморфным Si₃N₄. В последнем случае, впервые, описан интересный механизм деформации, когда пластическое течение осуществляется за счет попеременного перестроения атомов в аморфном слое и межфазного проскальзывания, а не в результате развития дефектов в кристаллическом слое.

Текст диссертации достаточно хорошо написан, содержание логически выстроено и отвечает на поставленные вопросы. Несмотря на это, она не лишена некоторых недостатков, что не портит общего положительного впечатления от проделанной работы.

Автореферат строго соответствует полному тексту диссертации.

4. Значимость результатов диссертационных исследований для развития науки

Прежде всего, теоретическая значимость диссертационной работы состоит в расширении наших знаний в области наноматериалов и нанотехнологий. Данные, полученные соискателем, могут быть использованы другими учеными для дальнейшего изучения и оптимизации структур НК систем. Выявленные закономерности изменения свойств НК материалов при формировании ЗГ сегрегаций представляют особую научную ценность в инженерии границ зерен НК материалов. Кроме того, обнаруженная модель упрочнения ВЭСов когерентными наночастицами и повышение когезии границ Al сегрегацией атомов других элементов представляет особую теоретическую значимость, т.к. они внедряют новые научные идеи для создания НК материалов, содержащих подобные структурные элементы. Несомненную научную ценность представляет также результат воздействия ЗГ сегрегаций на смещение точки начала мартенситного превращения в сплавах с эффектом памяти формы на основе NiTi, т.к. это может быть использовано для выявления подобного феномена при моделировании сплавов других систем.

5. Значимость результатов диссертационных исследований для практики

Результаты проведенных исследований несут также практическую ценность. Так, например, обнаруженные закономерности изменения прочности НК ВЭСов Кантора при смене концентрации тех или иных элементов могут быть полезны при разработке новых усовершенствованных НК сплавов, используемых в качестве конструкционных материалов в производстве. Помимо этого, автором даны рекомендации по химической модификации Al с целью получения прочного НК бинарного сплава Al. Особой практической значимостью обладает обнаруженный соискателем эффект снижения температуры начала мартенситного превращения в НК сплавах с ЗГ сегрегациями. Этот результат может быть полезен для создания материалов, проявляющих свои уникальные функциональные особенности в условиях криогенных температур. А описанные в диссертации особенности деформации некоторых слоистых гетероструктур на основе Si важно учитывать в электронике при создании схожих полупроводниковых материалов, где ключевую роль играют границы раздела.

6. Конкретные рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации

Результаты, представленные автором в диссертационной работе, прежде всего, представляют интерес для металлургической промышленности, основной задачей которой является получение новых сплавов с отличительными свойствами путём изменения химического состава и/или термомеханической обработки. В частности, найденные зависимости прочности от состава НК ВЭСов, влияние размера атомов ЗГ сегрегации бинарных сплавов Al, а также влияние структуры границ зерен на мартенситные превращения в НК сплавах на основе NiTi, могут быть использованы в качестве рекомендаций при разработке новых конструкционных многокомпонентных сплавов, а также для получения сплавов с особыми функциональными характеристиками, обусловленными ЭПФ. Представленные результаты также могут быть использованы специалистами в области электроники, занимающимися синтезом новых наноразмерных слоистых гетероструктур на основе Si.

Кроме того, применение результатов исследования возможно в следующих научных и образовательных организациях: ФГБОУ ВО «ЧелГУ» (г. Челябинск), ФГБОУ ВО «УУНиТ» (Уфа), ФГБОУ ВО «СПбГУ» (г. Санкт-Петербург), АНОО ВО «Сколтех» (г. Москва), ФГАОУ ВО «НИЯУ МИФИ» (г. Москва), ИФМК «УФИЦ РАН» (г. Уфа), ФГАОУ ВО «МФТИ» (Московская область, г. Долгопрудный), ФГБУН ИФМ им. М.Н. Михеева УРО РАН (г. Екатеринбург) и других.

7. Замечания по диссертационной работе

1) В работе большое внимание уделено 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, рассмотренного 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 LAMMPS, 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 ЗГ 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.

8. Апробация

Представленные результаты диссертационной работы прошли достаточную апробацию. Основные положения работы нашли свое отражение, по меньшей мере, в 47 статьях, опубликованных в авторитетных российских и международных научных журналах. Результаты проведенных исследований были также представлены на различных отечественных и международных конференциях.

9. Заключение

Диссертация Бабичевой Р.И. на соискание ученой степени доктора физико-математических наук является завершенной 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 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.

Диссертация соискателя и отзыв на нее были заслушаны и обсуждены на семинаре отдела полимеров и композиционных материалов ФГБУН Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова Российской академии наук 2 декабря 2025 года (протокол № 14). Результаты голосования: «За» - 11 чел., «Против» - *нет*, «Воздержались» - *нет*.

Отзыв составил:

Ведущий научный сотрудник лаборатории физики и механики полимеров ФИЦ ХФ РАН

д.ф.-м.н.

 / Савин Александр Васильевич
02.12.2025

Подпись Савина А. В. удостоверяю,

Ученый секретарь ФИЦ ХФ РАН, к.ф.-м.н.

 / Михалева Мария Геннадьевна



Сведения о ведущей организации

Наименование организации: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук

Адрес: 119991, Москва, ул. Косыгина, 4

Тел.: +7 499 137-29-51; +7 495 939-72-03

Эл. почта: icp@chph.ras.ru

Сайт: chph.ras.ru