

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу Бабичевой Риты Исмагиловны «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

Актуальность темы диссертационной работы

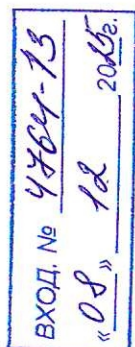
Основными задачами материаловедения являются разработка перспективных материалов и внедрение новых методов их получения. Моделирование выступает важным инструментом при решении данных задач. В частности, методы атомистического моделирования позволяют предсказывать структуру, свойства и влияние различных дефектов на поведение наноматериалов, существенно сокращая количество дорогостоящих и длительных экспериментов для установления этих закономерностей. Одним из важных типов дефектов в кристаллических материалах являются границы зерен и межфазные границы. В связи с этим задача использования молекулярной динамики (МД) в исследовании границ раздела в нанокристаллических (НК) объектах, несомненно, является важной.

В работе рассмотрены различные классы НК материалов, такие как алюминиевые и многокомпонентные сплавы или материалы, обладающие эффектом памяти формы, которые представляют научный и практический интерес в различных отраслях промышленности. Задачи, поставленные автором в данной диссертационной работе, безусловно являются **актуальными**, так как они совпадают с трендом повышения роли методов компьютерного моделирования в разработке перспективных материалов, изучение которых экспериментальными методами невозможно или несет определенные трудности.

Оценка содержания диссертации и ее завершенности

Представленная диссертационная работа состоит из введения, 6 глав, основных выводов, списка использованной литературы, включающего 289 наименований. Работа изложена на 286 страницах, содержит 132 рисунка и 9 таблиц. Структура работы автора выстроена таким образом, что ее содержание поэтапно раскрывает решаемые задачи исследования.

Во **введении** Бабичевой Р.И. четко определены цель и задачи исследований,



обоснована актуальность темы диссертационной работы и ее практическая значимость. Кроме того, здесь приведены основные положения, выносимые на защиту, и научная новизна полученных результатов.

В **главе 1** проработано современное состояние изучаемых вопросов, проведен анализ отечественных и зарубежных работ в области НК материалов. Акцент уделяется преимущественно алюминиевым сплавам, высокоэнтропийным сплавам (ВЭСам) и сплавам на основе NiTi, демонстрирующим память формы. В данном разделе также описан основной метод моделирования, применяемый в диссертационной работе, показаны его преимущества и недостатки по сравнению с другими подходами моделирования. Использованный библиографический список репрезентативен и достаточен для получения общего представления по рассматриваемым проблемам. В целом, в результате приведенного обзора литературы раскрывается актуальность проведенных далее исследований.

Первый цикл работ автора, описанный в **главе 2**, сфокусирован на изучении Al сплавов с НК структурой. Здесь раскрывается влияние особенностей границ зерен (ГЗ) на их прочность. В частности, рассматриваются ГЗ различной геометрии и изучается влияние наличия в них примесей. При анализе эффекта зернограницных (ЗГ) сегрегаций автор делает выводы, основываясь на результатах молекулярной статики и молекулярной динамики с использованием различных расчётных ячеек. В этом разделе также акцентируется внимание на механизмах деформации и эволюции структуры НК Al сплавов. Надежно установлено влияние размера сегрегирующих элементов по отношению к размеру матричного элемента на свойства ГЗ.

В **главах 3 и 4** представлены результаты исследования НК ВЭСов Кантора и НК тугоплавких ВЭСов, соответственно. Для получения результатов в данных разделах помимо МД автором также был задействован метод Монте-Карло. Он был использован для получения более равновесных структур и имитации диффузии атомов. Отмечу рациональность комбинирования этих двух методов, т.к. это позволило определить типы ЗГ сегрегаций и кластеров, формирующихся в рассматриваемых системах в результате упорядочения атомов. В разделах тщательно анализируется влияние ГЗ, ближнего порядка и когерентных частиц на деформационное поведение сплавов. На основе полученных результатов автор дает рекомендации по выбору состава сплава с улучшенными характеристиками.

В следующем разделе диссертационной работы (**глава 5**) Бабичева Р.И. анализирует влияние типа ГЗ на температуру мартенситного превращения в нитиноле (NiTi). Помимо влияния геометрии границ (ГЗ кручения или наклона), также здесь изучается смещение температур фазового перехода при наличии сегрегаций атомов Ni или Ti в границах. Подчеркну, что обнаруженные автором эффекты являются вполне закономерными и подтверждаются экспериментальными наблюдениями схожих систем другими авторами.

Заключительная **глава 6** стоит несколько обособленно от предыдущих разделов, т.к. здесь объектами исследований выступают материалы на основе неметаллического Si. Несмотря на это, автор не отходит от основной тематики работы, фокусируясь, как и в предыдущих случаях, на изучении границ раздела с помощью МД.

В целом, текст диссертации выглядит вполне структурированным и логически выстроенным, а сделанные выводы четко соответствуют решаемым задачам.

Научная и практическая значимость полученных результатов

Практическая значимость работы заключается в возможности использования полученных результатов и выявленных закономерностей для разработки и оптимизации НК материалов с целью их использования на практике. Например, на основе полученных результатов моделирования даны рекомендации по выбору состава алюминиевых сплавов и ВЭСов, отличающихся повышенными механическими характеристиками, а учет смещения температур мартенситного превращения, вызванного присутствием сегрегаций в ГЗ, важен при конструировании деталей с требуемыми функциональными свойствами, обусловленными эффектом памяти формы. Обнаруженные в работе закономерности могут быть применены в инженерии границ зерен с целью оптимизации свойств различных конструкционных материалов.

Достоверность полученных научных результатов

Доказательность выводов обеспечивается использованием в диссертационной работе Бабичевой Р.И. хорошо разработанных методов компьютерного моделирования и соблюдением устоявшихся математических принципов анализа структуры и свойств материалов на атомарном уровне. Используемый в работе программный пакет LAMMPS на сегодняшний день

является одним из наиболее востребованных для изучения материалов на наноуровне, а метод Монте-Карло, применяемый для имитации диффузии, повышает достоверность и ценность полученных результатов. Кроме того, представленные в работе результаты согласуются с имеющимися более ранними экспериментальными работами по рассматриваемой тематике, а труды автора, опубликованные в российских и зарубежных журналах, прошли достаточно строгий этап рецензирования.

Можно выделить следующие основные пункты **научной новизны**:

- методом МД автором определены типы сегрегирующих элементов в границах зерен Al, которые способствуют улучшению прочности мелкозернистой структуры. Обнаружена закономерность, что с уменьшением размера таких элементов, этот эффект проявляется сильнее.
- с помощью МД и Монте-Карло показано, что формирование в высокоэнтропийных сплавах Кантора и тугоплавких ВЭСах упорядоченных кластеров, имеющих когерентные границы раздела с матрицей, а также присутствие зернограницных сегрегаций определяют механические свойства соответствующих НК структур. Даны рекомендации по выбору оптимального состава сплавов с точки зрения повышения их механических характеристик.
- проведен МД анализ влияния типа ГЗ и их состава на особенности мартенситных превращений в НК сплавах NiTi. Выявлено, что фазовые превращения в структуре с ГЗ кручения наступают с задержкой по сравнению со структурами, имеющими ГЗ наклона. Дана оценка влияния структурных особенностей формирующихся в ГЗ сегрегаций на температуры мартенситных переходов.

Апробация и публикации. Материалы диссертационной работы отражены в статьях, опубликованных в российских и зарубежных журналах с высоким рейтингом. Кроме того, результаты исследований были представлены очно на различных конференциях, включая зарубежные, например, в Японии, США и Сингапуре. В общем, по теме диссертации опубликовано 47 научных статей в журналах ВАК РФ. Среди них 9 работ в журналах по специальности 2.6.6, и 35 статей в изданиях, входящих в международные базы данных Scopus и Web of Science, с рейтингом Q1 или Q2.

Замечания по диссертационной работе.

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.

Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней

Диссертационная работа Бабичевой Р.И. является научно-исследовательским трудом, выполненным автором самостоятельно на высоком научном уровне. Автореферат и представленные публикации полностью отражают содержание диссертации. Полученные результаты и сделанные выводы обоснованы и достоверны. Они расширяют наши знания в области структуры и свойств наноматериалов. Работа содержит практические рекомендации по усовершенствованию структуры и свойств сплавов для их применения в различных отраслях, таких как машиностроение и медицина. Тема и содержание диссертационного исследования соответствуют научной специальности 2.6.6 – Нанотехнологии и наноматериалы.

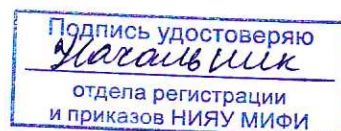
Таким образом, можно заключить, что диссертационная работа Бабичевой

Р.И. на тему «Границы раздела в нанокристаллических материалах: молекулярно-динамическое моделирование» является законченной научно-квалификационной работой, которая удовлетворяет требованиям пп. 9-14 Положения о присуждении учёных степеней (утв. постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 № 842), предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени доктора наук, а соискатель Бабичева Рита Исмагиловна заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 2.6.6. Нанотехнологии и наноматериалы.

Доктор физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, доцент, заведующий кафедрой физики твердого тела и наносистем (№70) института лазерных и плазменных технологий ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (НИЯУ МИФИ), адрес: 115409, г. Москва, Каширское шоссе, 31
E-mail: Mike.Maslov@gmail.com;
тел.: +7 (495) 788-56-99

Маслов Михаил Михайлович

Маслов
26.11.2025 г.



В.М. Самодурова