

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

1. Актуальность темы

Получение новых перспективных материалов с улучшенными характеристиками является важным вопросом материаловедения. Необходимость исследования наноматериалов связана с их уникальными физико-химическими свойствами, которые появляются при нанометровых размерах частиц и структур. Разработка новых перспективных материалов открывает новые возможности для создания высокопрочных, износостойких и функциональных продуктов и эффективных технологий. Диссертационная работа Бабичевой Р.И. посвящена изучению границ раздела в нанокристаллических (НК) материалах. Границы раздела в поликристаллических металлах и сплавах представляют собой переходные слои между отдельными кристаллитами (зернами) или фазами, которые определяют свойства материала в целом. Важность изучения границ раздела в НК металлах и сплавах обусловлена тем, что, в отличие от крупнокристаллических структур, плотность границ в них очень высока. Последний факт, в свою очередь, играет ключевую роль в формировании уникальных свойств таких материалов, и потому, их исследование необходимо и является важным для понимания и управления поведением наноматериалов. В связи с чем *актуальность* выбранной темы диссертации неоспорима.

2. Структура и содержание работы

Основная часть диссертации Бабичевой Р.И. состоит из введения, 6 глав, 5 из которых содержат оригинальные результаты, выводов и списка

литературы из 289 наименований. Работа изложена на 286 страницах машинописного текста.

Введение оформлено по требованиям ВАК РФ и содержит все необходимые структурные элементы. Здесь обоснована актуальность выбранной темы диссертации, сформулированы цели и задачи, представлены теоретическая и практическая значимость, обоснована достоверность, а также выдвинуты пункты научной новизны и положений, выносимых на защиту. В конце введения присутствует информация об апробации работы, личном участии в написании диссертации и публикациях автора.

Первая глава посвящена литературному обзору по теме диссертации. Глава в общих чертах знакомит читателя с НК материалами и раскрывает ряд существующих проблем, обусловленных сложностью их экспериментального исследования. Подчеркивается важность применения методов компьютерного моделирования, в частности, молекулярной динамики, для изучения их структуры и свойств. В разделе дано краткое описание метода молекулярной динамики (МД). Выделены основные плюсы и недостатки этого подхода. Далее проводится обзор работ по МД моделированию НК материалов, таких как сплавы алюминия (Al), высокоэнтропийные сплавы (ВЭСы) и нитинол (NiTi). Отмечается, что МД может помочь с поиском новых материалов и усовершенствованием НК структур, что важно для развития nanoиндустрии.

Вторая глава посвящена изучению НК Al сплавов. Здесь преимущественно рассматривается вопрос влияния различных примесных элементов в ГЗ на прочность бинарных Al сплавов. Для этого рассчитывается потенциал охрупчивания и проводится МД моделирование деформации рассматриваемых бикристаллических и НК систем. На основании проведенного исследования дается оценка влияния различных примесных элементов на прочность ГЗ. Далее в главе затрагиваются такие вопросы как механическое растворение зернограницных (ЗГ) сегрегаций и усталостное поведение НК Al сплавов.

В **третьей главе** в качестве материалов исследования выступают НК ВЭСы Кантора CoCrFeNi и Al(8ат.%)–CoCrFeNi. МД модели здесь представлены бикристаллическими расчётными ячейками, различающимися типом ГЗ. В данном случае предварительная релаксация исследуемых сплавов

осуществляется с использованием двух методов, Монте Карло и МД. В результате проведенной релаксации обнаружено формирование γ сегрегаций и кластеров упорядоченных фаз. Далее изучается влияние химического упорядочения и изменение химического состава ГЗ на деформацию сплавов при сдвиге в сравнении с поведением соответствующих материалов до релаксации. В главе также анализируется влияние химического состава на процесс упорядочения в сплавах систем Cr-Co-Ni и Cr-Fe-Co-Ni и даются рекомендации по выбору оптимального состава.

Четвертая глава посвящена жаропрочным НК эквиатомным ВЭСам TiNbVZr, TaTiNbZr, HfNbTiZr и ВЭСам системы Nb-Ta-Hf-Zr. В разделе рассматривается влияние границ раздела, образующихся в процессе релаксации методами Монте Карло и МД, на поведение материалов при деформации. Обнаружено, что степень упорядочения атомов определенных элементов зависит от их содержания в сплаве, а формирование γ сегрегаций определяется рядом факторов, в числе которых атомный радиус и геометрия ГЗ. Как и в предыдущей главе далее анализируется влияние сетки ГЗ и упорядоченных кластеров, имеющих когерентные с матрицей границы, на механизмы деформации и прочность рассматриваемых систем.

В *пятой главе* изучается влияние структуры ГЗ на фазовые превращения в НК сплавах нитинола. В первой части главы сравниваются особенности мартенситных превращений, протекающих в бикристаллах NiTi с ГЗ кручения или ГЗ наклона. Показано, что мартенситное превращение в образцах с ГЗ кручения наступает значительно позднее. Вторая часть раздела изучает фазовые переходы в нитиноле с γ сегрегацией Ni или Ti. Делается вывод, что характер структуры формирующейся в границе сегрегации (аморфный слой, тонкая пленка и т. п.) может определять точку начала мартенситного превращения.

В последней *шестой главе* описаны результаты исследования деформационного поведения и характера разрушения бикристаллов Si с ГЗ кручения или ГЗ наклона в процессе их растяжения при различных температурах. В разделе также оценивается влияние межфазной границы на прочность и механизмы деформации нанопленки, образованной слоями кристаллического Si и аморфного $a\text{-Si}_3\text{N}_4$.

3. Достоверность и обоснованность научных положений и выводов

Глубокий анализ литературных источников по теме диссертации, сравнение с имеющимися экспериментальными данными, а также применение широко используемых методов моделирования и анализа результатов моделирования, с созданием реалистичных компьютерных моделей, подтверждает **достоверность** полученных в диссертационной работе результатов и **обоснованность** выдвигаемых положений и выводов. Кроме того, большинство выносимых в диссертации Бабичевой Р.И. положений прошли проверку при рецензировании ее трудов, опубликованных в журналах квартиля Q1 или Q2.

4. Научная новизна диссертационной работы заключается в установлении связи между параметрами структуры и свойствами НК материалов на основе систематического анализа влияния дефектной структуры, в частности, различных ГЗ и межфазных границ, на прочностные, некоторые физические и функциональные свойства бинарных сплавов Al, ВЭСов, нитинола и других НК материалов. Например, с использованием МД, впервые было показано, что примесные атомы в ГЗ, имеющие меньший размер, чем у атомов матричного элемента (Al), способны повысить прочность ГЗ, а дислокационное скольжение при интенсивной пластической деформации вносит больший вклад в механическое растворение атомов ЗГ сегрегаций, чем ЗГ проскальзывание.

5. Теоретическая и практическая значимость.

Результаты моделирования, полученные автором, несомненно, расширяют существующие знания о влиянии структурных особенностей различных НК материалов на их поведение при воздействии внешних факторов, и потому имеют **теоретическую ценность**. Кроме того, они обладают **практической ценностью**, поскольку могут быть использованы при разработке новых сплавов с улучшенными характеристиками, необходимыми для использования материала в различных отраслях, таких как авиационная и автомобильная промышленности.

6. Оформление диссертации и соответствие паспорту специальности

Работа оформлена обдуманно и логично, в соответствии с требованиями ВАК РФ, предъявляемым к докторским диссертациям. Текст, изложенный в автореферате, полностью соответствует содержанию диссертации.

Содержание работы *соответствует паспорту специальности 2.6.6. Нанотехнологии и наноматериалы*. По теме диссертации опубликовано 47 работ в рецензируемых российских и зарубежных журналах с высоким рейтингом, в числе которых 9 публикаций в журналах из перечня ВАК, рекомендованных по специальности 2.6.6. Нанотехнологии и наноматериалы.

7. Замечания

Имеется ряд замечаний по диссертационной работе, которые, однако, не снижают ценности представленной работы.

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.

В заключение отмечу, что диссертационная работа Бабичевой Риты Исмагиловны «Границы раздела в нанокристаллических материалах: молекулярно-динамическое моделирование», представленная на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, представляет собой законченное научное исследование в области нанотехнологий и наноматериалов. Открытия и научно-обоснованные выводы, сделанные в работе, могут внести положительный вклад в развитие нанотехнологий в России, и поэтому *отвечают требованиям к докторским диссертациям* ВАК РФ (пп. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденных постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. №842). Считаю, что Бабичева Р.И. заслуживает присуждения ей ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 2.6.6. Нанотехнологии и наноматериалы.

Доктор физико-математических наук
(1.3.8 – физика конденсированного состояния),
профессор, ведущий научный сотрудник
ФГБОУ ВО «Алтайский государственный
технический университет им. И.И. Ползунова»,
e-mail: gmpoletaev@mail.ru
тел.: +79132362365



Полетаев Геннадий Михайлович
24.11.2015

Подпись заверяю:

Начальник Управления кадров и
документационного обеспечения АлтГТУ



С.В. Ананьин

ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова», 656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр. Ленина, 46
Адрес эл. почты: politeh@altgtu.ru
Телефон: +7 (3852) 290710