

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию 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

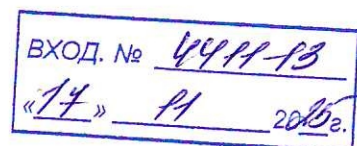
Актуальность

Материаловедение ставит перед собой две ключевые задачи: создание новых перспективных материалов и внедрение инновационных технологий их производства. В настоящее время компьютерное моделирование играет важнейшую роль в решении этих задач. Атомистическое моделирование позволяет предсказывать структуру и свойства наноматериалов при различных внешних воздействиях и условиях окружающей среды, зачастую это значительно сокращает необходимость проведения дорогостоящих и продолжительных экспериментов.

Границы зерен (ГЗ) и межфазные границы, а также двойниковые границы являются неотъемлемой частью поликристаллических материалов, оказывая существенное влияние на их свойства. В случае нанокристаллических (НК) материалов плотность границ в структуре настолько высока, что это может кардинально влиять на их свойства. В связи с этим, применение соискателем такого метода изучения границ раздела в НК системах как молекулярная динамика (МД) приобретает особую **актуальность**. Стоит отметить, что в работе рассмотрены различные НК системы, отличающиеся как составом, так и свойствами, однако выбор их объектами исследования вполне понятен, т. к. они все представляют не только научный, но и практический интерес, поскольку используются в различных отраслях промышленности.

Оценка содержания и структуры диссертации

Диссертационная работа Риты Исмагиловны состоит из введения, шести глав, заключения и списка литературы. Работа представлена на 286 страницах машинописного текста, содержит 132 рисунка и 9 таблиц. В списке литературы 289 наименований.



Введение

Согласно требованиям к оформлению диссертаций, во введении формулируются цели исследования, обсуждается актуальность работы, новизна и практическая значимость. Помимо этого, здесь обосновывается достоверность полученных результатов, формулируются основные положения, выносимые на защиту, а также описан личный вклад автора и апробация ее трудов.

Глава 1

В данном разделе делается достаточно подробный обзор последних экспериментальных и теоретических работ в области наноматериалов и нанотехнологий. Особое внимание уделено НК металлическим материалам. В частности, описываются их типичные свойства и основные методы получения мелкозернистой и наноструктуры. Кроме того, читателя вкратце знакомят с основными методами моделирования, применяемыми в работе. Показана эффективность компьютерного моделирования, в частности, применения МД в изучении наноматериалов и развитии нанотехнологий в целом. Подчеркивается, что несмотря на большое количество работ в этом направлении, существует множество нерешенных задач, касающихся структуры границ раздела и их влияния на свойства НК материалов.

Последующие главы отражают результаты исследований автора по теме диссертации.

Глава 2

Эта глава посвящена решению первых двух задач диссертации, перечисленных во введении. В частности, здесь автор исследует свойства ГЗ НК сплавов Al при наличии в них различных элементов, как в форме твердого раствора, так и сегрегированных по ГЗ. Для этого автор рассчитывает изменение когезии границ, вызванное примесными атомами. Обнаружен интересный эффект: упрочнение границ происходит, когда размер примесного атома меньше, чем у Al, причем, чем больше разница в атомном радиусе, тем более выражен этот эффект.

Для ответа на второй вопрос моделировалась сдвиговая деформация сплава Al-Zr с Zr в ГЗ, ориентированных различным образом по отношению к

приложенной нагрузке. На основе полученных результатов сообщается, что дислокационное скольжение при интенсивной пластической деформации способствует механическому растворению труднорастворимой примеси.

Глава 3

Этот раздел диссертации изучает границы и ближний порядок в НК высокоэнтропийных сплавах (ВЭСах) Кантора, в частности, рассматривается влияние дефектной структуры и кластеризации в процессе релаксации на прочность НК ВЭСа CoCrFeNi с добавкой Al и ВЭСов системы Co-Cr-Fe-Ni. Для этого автор комбинирует МД и моделирование методом Монте-Карло. Анализ эволюции дефектной структуры и прочностных характеристик сплавов здесь проводится путем расчета энергии дефекта упаковки. Было обнаружено, что сегрегация атомов в ГЗ и присутствие когерентных кластеров с упорядоченным расположением различных элементов способствует увеличению предела текучести.

Глава 4

Объектами исследований данной главы являются жаропрочные НК ВЭСы. Соискателем изучен вопрос влияния сетки ГЗ и химического состава на процесс атомного упорядочения, а также на формирование сегрегаций и химических соединений в структуре. В разделе дана оценка упрочнения когерентными частицами НК эквиатомных ВЭСов TiNbVZr, TaTiNbZr и HfNbTiZr, а также ВЭСов системы Nb-Ta-Hf-Zr. При моделировании деформации сплавов автором были выявлены механизмы повышения предела текучести, среди которых атомное упорядочение, приводящее к формированию частиц, а также образование сегрегаций по ГЗ вносят немаловажный вклад. Доказано, что эти процессы могут приводить к локальной неоднородности по составу и, таким образом, тормозить фазовое превращение и зарождение дислокаций при приложении нагрузки.

Глава 5

В данном разделе диссертации с помощью МД автором анализируется воздействие ГЗ на мартенситное превращение (МП) в НК сплавах NiTi. В первой части главы изучаются особенности фазового перехода в образцах с ГЗ

различного химического состава, а именно с сегрегацией атомов Ni или Ti. Показано, что в изучаемых материалах, по сравнению с NiTi без соответствующих сегрегаций, фазовое превращение задерживается. Автор объясняет это пластической аккомодацией и уменьшением упругих напряжений вблизи ГЗ, обусловленных присутствием прослойки сегрегирующих атомов (Ni или Ti).

Во второй части главы рассматривается МП в бикристаллах NiTi, имеющих ГЗ разного типа (ГЗ наклона $\Sigma 25(710)\langle 010 \rangle$ и ГЗ кручения $\Sigma 25(001)\langle 001 \rangle$). Обнаружено, что МП в бикристаллах с ГЗ кручения подавлен существенно сильнее по сравнению с образцами, имеющими ГЗ наклона. Этот эффект объясняется очень низкими напряжениями, создаваемыми границами кручения. Сравнивая полученные данные с уже существующими результатами экспериментальных исследований, автор подтверждает их достоверность.

Глава 6

В последней главе объектами исследований выступают материалы на основе кремния. В первой части изучаются бикристаллы чистого кремния с разным типом ГЗ, а во второй части моделируются наноккомпозиты, образованные слоями кристаллического кремния и аморфного соединения Si_3N_4 . Анализируются развитие деформации и разрушение образцов в присутствии соответствующих границ раздела.

В целом, текст диссертации выглядит вполне упорядоченным и систематизированным. Проведенная работа, сформулированные выводы и основные положения четко соответствуют цели и задачам диссертации. *Автореферат* в достаточно полной мере отражает содержание диссертационной работы.

Научная и практическая ценность работы

Полученные данные и установленные закономерности представляют собой как научный, так и практический интерес, т. к. могут быть полезны при разработке новых сплавов и/или в инженерии границ зерен и усовершенствовании НК структуры уже имеющихся материалов, предназначенных для использования на практике. Результаты, полученные автором, могут быть использованы в качестве рекомендаций при выборе состава

некоторых бинарных Al сплавов, а также ВЭСов, с отличительными эксплуатационными характеристиками. Обнаруженные особенности эволюции структуры и фазовых переходов, обусловленные присутствием тех или иных границ и сегрегаций в них, важно учитывать при проектировании изделий с конструкционными и функциональными свойствами для их использования, например, в машиностроении, медицине или наноэлектронике.

Достоверность

Надежность сформулированных выводов подтверждается применением в рамках данной работы автором общепризнанных методов моделирования, таких как методы МД и Монте-Карло, а также их комбинацией. Научные результаты, содержащиеся в работе, не противоречат устоявшимся закономерностям материаловедения и согласуются с имеющимися экспериментальными наблюдениями по рассматриваемой проблеме. Автор руководствуется общепринятыми математическими подходами анализа структуры и свойств. Кроме того, как видно из списка опубликованных трудов соискателя, многочисленные *публикации* автора в научных изданиях России и других стран успешно выдержали тщательную процедуру экспертизы, а результаты исследований были *апробированы* на отечественных и зарубежных конференциях.

Научная новизна

В работе Риты Исмагиловны, несомненно, имеются научные результаты, полученные впервые. Среди них можно выделить следующие:

1. Атомы замещения в ГЗ, имеющие сопоставимые или меньшие атомные размеры в сравнении с размером Al, способствуют повышению прочности границ соответствующего бинарного Al сплава, тогда как атомы элементов с большим атомным радиусом снижают ее.
2. Среди рассмотренных элементов в ГЗ двухкомпонентных Al сплавов кобальт оказался наиболее эффективным для повышения когезии границ.
3. Существует взаимосвязь между химическим составом и тенденцией к упорядочению в многокомпонентных сплавах. Увеличение доли элементов,

склонных к образованию соединений, уменьшает тенденцию к упорядочению и формированию таких частиц.

4. Сегрегация атомов Ti или Ni в границы NiTi, приводящая к локальной аккомодации деформации, задерживает образование мартенсита.

Вместе с тем, несмотря на общее положительное впечатление от работы, по ней имеется ряд замечаний.

Замечания по диссертационной работе

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 изменятся 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.

Заключение

Несмотря на ряд замечаний, отмеченных выше, оппонируемая диссертация представляет собой полноценную научную работу, написанную соискателем на высоком уровне с соблюдением всех требований ВАК. Обнаруженные автором эффекты и закономерности обогащают существующие представления и увеличивают наши знания о природе НК материалов. В исследовании содержатся конкретные предложения по улучшению состава сплавов и их структуры, способствующие повышению механических и функциональных свойств, необходимых для использования НК материалов в разнообразных сферах деятельности человека, включая авиационную и автомобильную промышленности. Содержание диссертации в полной мере отражено в автореферате, а представленные результаты опубликованы в большинстве работ автора по рассматриваемой тематике. Тема и содержание представленной диссертации полностью соответствует направлению научной специальности 2.6.6 – Нанотехнологии и наноматериалы.

В заключение можно отметить, что диссертация Бабичевой Р.И. под названием «Границы раздела в нанокристаллических материалах: молекулярно-динамическое моделирование» удовлетворяет всем необходимым критериям, установленным пунктами 9–14 Положения о присвоении ученых степеней, утвержденного распоряжением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 для докторских диссертаций. Бабичева Рита Исмагиловна заслуживает присвоения ей искомой ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 2.6.6 – Нанотехнологии и наноматериалы.

Официальный оппонент:

Заведующий кафедрой информатики и
вычислительной техники им. В.К. Буторина
д.ф.-м.н. (специальность 01.04.07), доцент

Маркидонов
Артем Владимирович

Согласен на обработку персональных данных.

10.11.2025

Телефон: +7 (3843) 74-46-78

E-mail: markidonov_artem@mail.ru

Подпись Маркидонова А.В. подтверждаю.

Ведущий специалист кадровой службы

А.В. Михайлова

Кузбасский гуманитарно-педагогический институт федерального государственного
бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кемеровский
государственный университет»

654041, Кемеровская область, г. Новокузнецк, ул. Циолковского, 23