

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ  
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ  
(МИНОБРНАУКИ РОССИИ)

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования

«Кабардино-Балкарский государственный университет  
им. Х.М. Бербекова» (КБГУ)

Ул. Чернышевского, 173, Нальчик, КБР, 360004. Тел./факс (8-8662) 42-52-54  
E-mail: yka@kbsu.ru ОКПО 02069510, ОГРН 1020700739234, ИНН 0711037537, КПП 072501001

10.04.2023 № 01.01-20/1583  
На № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_

**УТВЕРЖДАЮ**

И.о. проректора по НИР  
федерального государственного  
бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования  
«Кабардино-Балкарский  
государственный университет  
им. Х.М. Бербекова»  
д.х.н. профессор

С.Ю. Ханирова

« 10 » 04 2023 г.

**ОТЗЫВ**

ведущей организации федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» на диссертационную работу Богданова С.С. «Закономерности структурообразования в бинарных наночастицах ГЦК металлов при термическом воздействии: атомистическое моделирование», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния

**1. Актуальность темы диссертации**

Диссертационная работа С.С. Богданова посвящена исследованию закономерностей и механизмов структурообразования, в том числе сегрегационных явлений в бинарных металлических наночастицах, в частности, закономерностей и механизмов формирования структур типа «ядро-оболочка».

К настоящему времени не вызывает сомнений перспективность наноматериалов, в том числе бинарных металлических наночастиц для

применения в различных областях науки и технологий. В последние годы наряду с дальнейшим развитием экспериментальных подходов все больше внимания уделяется разработке численных и аналитических методов прогнозирования свойств наночастиц и наносистем. С одной стороны, это обусловлено трудоемкостью экспериментальных методик, в том числе в части синтеза наночастиц, с другой стороны, такие экспериментальные установки являются дорогостоящими в создании и дальнейшем обслуживании. В настоящее время, в основном, успешно конкурируют два подхода для компьютерного моделирования наносистем: метод молекулярной динамики (МД) и метод Монте-Карло (МК).

При этом одной из основных проблем синтеза наночастиц является проблема их стабилизации. В частности, возможны различные сценарии потери стабильности: потеря огранки или исходной формы; изменение интегральной структуры бинарных наносплавов, т.е. переход структуры ядро-оболочка в наночастицу с равномерным, в некотором приближении, распределении компонентов; распад наночастицы на нанокластеры меньшего размера. На самом деле проблема стабильности/нестабильности наночастиц не имеет даже четкой постановки и, соответственно, исчерпывающего решения, несмотря на ее значимость с фундаментальной и прикладной точек зрения.

Например, можно выделить следующие случаи стабильности/нестабильности: термическая стабильность/нестабильность, т.е. стабильность по отношению к изменению температуры; механическая стабильность/нестабильность; нестабильность, обусловленная реакционной способностью наночастиц и наноразмерных структурных элементов наноматериалов. В диссертационной работе отмечается, что стабильность/нестабильность наночастиц типа ядро-оболочка  $A@B$  и  $B@A$  (первый символ – ядро, второй – оболочка), с одной стороны, должна зависеть от метода их получения, но, с другой стороны, более важными факторами являются состав, структура, размер, температурный интервал, внешнее давление и другие параметры.

Таким образом, вариативность наноструктур позволяет получать композиции, обладающие специфическими физико-химическими свойствами, а изучение закономерностей и механизмов структурообразования в таких наносистемах, а также факторов, влияющих на их стабильность/нестабильность, является актуальной задачей.

## **2. Краткий анализ содержания диссертации**

**Во введении** традиционно обосновывается актуальность темы исследований, сформулированы цели и задачи диссертации, перечислены полученные результаты, дана характеристика их научно-практической ценности, а также аргументируются их обоснованность и достоверность. Также во введении приведены положения, выносимые на защиту, и в кратком изложении описано содержание разделов диссертации.

**В первой главе** представлен обзор основных направлений экспериментальных и теоретических исследований бинарных металлических на-

ночастиц. Отмечен также прикладной аспект исследования свойств бинарных металлических наночастиц.

**Во второй главе** автор описывает методику проведения компьютерного эксперимента в бинарных металлических наночастицах. Одним из ключевых вопросов является описание возможности и целесообразности применения потенциала сильной связи для описания взаимодействия в бинарных металлических наночастицах. Описаны также методики проведения компьютерного эксперимента при моделировании процесса избирательной коррозии, учета внешнего давления, а также подходов к интерпретации результатов, в частности, к идентификации локальной структуры бинарных металлических наночастиц.

**Третья глава** занимает центральное место в диссертации, поскольку посвящена прецизионному изучению закономерностей структурообразования в бинарных металлических наночастицах, в том числе в процессе кристаллизации бинарных металлических наночастиц под внешним давлением на примере наносистемы Au-Co. Подробно проанализированы результаты молекулярно-динамических экспериментов по моделированию процесса формирования биметаллических наноструктур ядро-оболочка методом закалки на примере биметаллических наночастиц Ni-Al. На наш взгляд, важным является раздел, посвященный идентификации наноструктур ядро-оболочка по радиальным распределениям локальной плотности компонентов.

**Четвертая глава** также содержит важные результаты по описанию процессов коалесценции и избирательной коррозии как методов синтеза биметаллических структур заданной конфигурации, в том числе систем типа ядро-оболочка, а также более сложных наноструктур. Методологический аспект описанных в данной главе результатов, безусловно, представляет интерес с точки зрения описания факторов стабильности/нестабильности биметаллических наноструктур типа ядро-оболочка.

### 3. Научная значимость результатов

С научной точки зрения наибольший интерес, на наш взгляд, представляют следующие методики и результаты диссертации С.С. Богданова:

1. Учет влияния внешнего давления на процессы формирования фазового состава в бинарных металлических наноструктурах и описание возможности получения бинарных металлических наноструктур различного фазового состава, обладающих различными физико-химическими характеристиками при одновременном учете размерного фактора и величины внешнего давления;

2. Применение комплексного подхода, т.е. двух альтернативных методов компьютерного моделирования (МД и МК) для исследования процесса избирательной коррозии в бинарных наночастицах на основе платины (Cu-Pt, Ni-Pt); фактически автором предлагалась и апробировалась методика синтеза наночастиц Cu-Pt и Ni-Pt с predetermined (контролируемой) структурой;

3. Установление условности понятий термической стабильности и нестабильности одной из наноструктур A@B или B@A;

4. Описание факторов, которые определяют возможность самосборки наноструктур ядро-оболочка для биметаллических наночастиц Ni-Al.

Эти результаты развивают теоретические представления о процессах структурообразования материалов на наноуровне и позволяют наметить и обосновать пути управления этими процессами.

#### **4. Практическая значимость результатов**

Как отмечает автор, результаты исследований, выполненных в рамках диссертационной работы, могут быть использованы и уже используются в процессах управляемого синтеза бинарных наночастиц. Так, процессы коалесценции и избирательной коррозии используются как способы получения биметаллических наночастиц со структурой ядро-оболочка. Кроме того, процесс избирательной коррозии позволяет также контролировать степень пористости таких наночастиц. Это, безусловно, представляет интерес для технологии создания нанокатализаторов за счет улучшения адсорбционных и каталитических свойств наночастиц, наноматериалов с заданными свойствами, повышения коррозионной стойкости материалов, а также доказывает то, что бинарные наночастицы могут быть использованы в качестве активных или пассивных элементов в нанoeлектронике.

#### **5. Степень обоснованности научных положений и выводов, сформулированных в диссертации, их достоверность и новизна**

Выводы, сформулированные в диссертации, логично вытекают из результатов исследований автора. Их обоснованность и достоверность подкрепляется следующими аргументами. Используемые в работе численные модели наносистем разработаны на основании признанных закономерностей фундаментальных наук, в том числе это касается используемого в расчетах потенциала межатомного взаимодействия. Полученные результаты не противоречат известным результатам других исследователей, как теоретическим, так и экспериментальным (при наличии последних). Можно согласиться с автором, что в пользу обоснованности и достоверности результатов исследования говорит тот факт, что часть из них получена в рамках грантов РФФИ и Минобрнауки РФ, следовательно, заявки получили положительную оценку в ходе научной экспертизы.

Новыми важными результатами, которые могут представлять интерес для науки, можно считать следующие:

1. Систематическое использование комплексного подхода, сочетающего использование двух альтернативных методов компьютерного моделирования: метода молекулярной динамики и метода Монте-Карло для выявления специфических особенностей и исключения артефактов при реализации различных сценариев эволюции структуры бинарных наночастиц.

2. Описание степени влияния внешнего давления и размерного несоответствия атомов на процессы формирования фазового состава в бинарных металлических наноструктурах.

3. Применение альтернативных методов компьютерного моделирования (МД и МК) для моделирования процесса избирательной коррозии в

бинарных наночастицах на основе платины, как способа синтеза бинарных наночастиц с необходимой/контролируемой структурой.

4. Установление условности понятий стабильности и нестабильности одной из наноструктур  $A@B$  или  $B@A$ , поскольку до определенной температуры стабильными могут быть обе эти структуры, а при увеличении температуры возможны различные сценарии потери их стабильности.

5. Описание факторов, способствующих самосборке наноструктур ядро-оболочка на примере биметаллических наночастиц Ni-Al.

6. Исследование двух технологических процессов – коалесценции и избирательной коррозии с позиций получения биметаллических наночастиц со структурой ядро-оболочка. Описание их специфических особенностей: характер коалесценции определяется способностью к поверхностной сегрегации одного из компонентов, а в процессе избирательной коррозии можно получить нанопористую структуру ядро-оболочка.

Научное сообщество имело возможность подробно ознакомиться и оценить результаты исследований автора данной диссертационной работы. Материалы диссертации были опубликованы в 12 печатных работах в рецензируемых научных изданиях (включая издания, входящие в международные базы данных Scopus и Web of Science), докладывались на 20 научных всероссийских и международных конференциях. С.С. Богданов входит также в число соавторов 3 свидетельств о регистрации программ для ЭВМ.

## **6. Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации**

Установленные в диссертационной работе закономерности структурообразования в бинарных наночастицах ГЦК-металлов при термическом воздействии представляют интерес для технологии получения металлических нанопорошков и технологии порошковой металлургии на наномасштабном уровне могут быть использованы в ФГБУН «Институт металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова Российской академии наук», в ФГБУН «Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова Российской академии наук» и ряде других научных учреждений России, ведущих практические исследования по аналогичной тематике. Методики моделирования закономерностей и механизмов структурообразования, в том числе сегрегационных явлений, могут быть распространены и на многокомпонентные металлические наночастицы и могут найти свое применение в научных коллективах, представляющих, например, ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университет им. Н.Ф. Катанова», НИТУ «МИСиС», ИжГТУ имени М.Т. Калашникова.

## **7. Замечания и вопросы по диссертации**

Основные замечания следующие.

1. Автор использует в качестве потенциала межатомного взаимодействия потенциал сильной связи. В пункте 2.2 диссертации описывается метод весовой функции (формула 2.6), и принимается значение весового коэффициента  $w=0,5$ . В дальнейшем также констатируется, что такой выбор соответствует правилу Лоренца-Бертло – когда параметры  $A$  и  $\zeta$  находят-

ся как средние геометрические величины, а  $p$ ,  $q$  и  $r_0$  как средние арифметические. Поскольку параметры  $A$  и  $\zeta$  в потенциале сильной связи отвечают за соотношение парной составляющей и многочастичной, стоило хотя бы кратко отметить, как повлияет на результаты моделирования использование другого весового коэффициента, большего или меньшего, чем 0,5.

2. В диссертации (рис. 30) и в автореферате (рис. 3) представлены две типичные концентрационные зависимости температуры кристаллизации для размеров  $N = 400$  и  $800$  в системе Au-Ag: зависимость с ярко выраженным минимумом и монотонно изменяющаяся зависимость. Какие возможны сценарии при увеличении размера бинарных наночастиц?

3. Одним из факторов, определяющих энергетические поверхностные характеристики наночастиц, является огранка. Возможно ли подобрать при компьютерном моделировании режимы, при которых в процессе кристаллизации и/или закалки будет восстанавливаться огранка?

4. Является ли энергетический критерий единственно возможным при выборе удаляемых атомов в процессе избирательной коррозии. Если нет, то возможно ли оценить, как изменятся результаты исследования в части структурных характеристик и энергетического спектра получаемых наночастиц на примере Cu-Pt и Ni-Pt.

5. При исследовании факторов стабильности/нестабильности для бинарных инверсных наночастиц Au@Co и Co@Au (пункт 4.3. диссертации) для фазового состава (рис. 71) получены достаточно схожие температурные диаграммы. Следует ли ожидать такого же поведения для других бинарных наночастиц аналогичного размера?

6. В работе Ruban A., Skriver H.L., Nørskov J.K. Surface segregation energies in transition-metal alloys. *Physical Review B Condensed Matter*. 1999. V. 59. I. 24. P. 15990-16000. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.15990> приведены значения энергий сегрегации для переходных металлов, имеющих ГЦК, ГПУ, ОЦК структуру. Прогнозируется, что в бинарной системе Ni-Cu должна наблюдаться управляемая сегрегация (moderate segregation). На наш взгляд, было бы интересно проверить данный эффект, используя альтернативные методы моделирования (МК и МД) на наномасштабах.

Имеется также менее принципиальное замечание.

В диссертации и автореферате указывается, что все компьютерные эксперименты проводились сериями, и приведена предельная погрешность изменений. Для наглядности на некоторых графиках ошибку расчетов следовало бы привести. Например, для рис. 43 а диссертации и рис. 4 а автореферата.

## 8. Заключение

Диссертационная работа С.С. Богданова является самостоятельной и законченной научно-квалификационной работой, выполнена на актуальную тему, обладает научной новизной и практической ценностью. Работа выполнена на высоком научном уровне и вносит существенный вклад в представления о закономерностях структурообразования в бинарных наночастицах ГЦК-металлов при термическом воздействии. Результаты, полу-

ченые автором, представляются достоверными, а сделанные в работе выводы – обоснованными.

Приведенные выше замечания не изменяют общей положительной оценки диссертационной работы и не снижают ее ценность.

Содержание диссертации достаточно полно отражено в опубликованных научных работах, докладах на конференциях и семинарах. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации и позволяет составить адекватное представление о выполненных исследованиях и полученных результатах.

Таким образом, диссертационная работа С.С. Богданова отвечает критериям «Положения о присуждении ученых степеней» (п. 9 – п. 14), утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013, соответствует паспорту специальности научных работников «Физика конденсированного состояния», а ее автор, Богданов Сергей Сергеевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Отзыв на диссертационную работу С.С. Богданова рассмотрен и утвержден единогласно на расширенном заседании кафедры электроники и цифровых информационных технологий Института информатики, электроники и робототехники федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» (протокол № 8 от 31.03.2023 года).

Профессор кафедры электроники и цифровых информационных технологий Института информатики, электроники и робототехники федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова» доктор физико-математических наук, профессор

Ахмед Мацевич Кармоков

360004, КБР, г. Нальчик, ул. Чернышевского, 173,  
Тел. +79287218818, email: karmokov@kbsu.ru