Отзыв

официального оппонента на диссертационную работу

Богданова Сергея Сергеевича

«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

Большинство современных исследований по синтезу и изучению свойств металлических частиц посвящено однокомпонентным системам. Наночастицы, содержащие несколько металлов или химических соединения, исследованы значительно хуже, хотя спектр свойств, обусловленный структурно-фазовым разнообразием таких систем, существенно шире. Главной причиной интереса к бикомпонентным наночастицам является то, что их физические и химические свойства определяются не только малым размером частиц, но и сложным фазовым составом, а их свойства могут существенным образом отличаться от свойств исходных компонентов. Среди бикомпонентных наночастиц можно выделить две базовые наноструктуры – наночастицы-янусы и наночастицы со структурой ядро-оболочка. Исследования закономерностей и механизмов структурных превращений в бинарных наносплавах, представленные в диссертационной работе, интересны как с научной точки зрения, так и с точки зрения многочисленных потенциальных практических применений. С точки зрения фундаментальных знаний особый интерес представляют исследования взаимодействий двух металлов на интерфейсе между ними. Также такие наночастицы могут применяться в медицине как в терапевтических, так и в диагностических целях, в пиротехнических составах, для получения объемных функциональных материалов с наноструктурой и др. Таким образом,

исследования формирования биметаллических наночастиц со структурой ядро-оболочка, представленные в рецензируемой диссертации, являются актуальными.

2. Степень обоснованности научных положений и выводов

Обоснованность защищаемых положений и выводов диссертации не вызывает сомнений и основывается на сопоставлении полученных результатов с имеющимися в литературе экспериментальными данными и данными компьютерного моделирования, публикации положений и выводов работы в рецензируемых журналах.

3. Оценка достоверности и новизны исследования

Достоверность результатов обусловлена применением апробированных и зарегистрированных компьютерных программ, тщательным анализом и отбором параметров, используемых для моделирования, воспроизводимостью полученных в рамках компьютерного эксперимента результатов.

Новизна исследования определяется использованием для оценки отдельных термодинамических и структурных характеристик бинарных наночастиц двух альтернативных методов компьютерного моделирования, выявлению влияния внешнего давления и размерного фактора на процессы формирования фазового состава в бинарных наночастицах, выявлению условий проявления нестабильности и факторов, способствующих самосборке модельных наноструктур ядро-оболочка.

4. Значимость полученных автором результатов для науки и практики

Полученные соискателем результаты значимы для физики конденсированного состояния и материаловедения наноразмерных структур.

Установлены условия формирования бинарных металлических наносплавов различной структуры и фазового состава, процесс избирательной коррозии в бинарных наночастицах на основе платины Cu-Pt / Ni-Pt, различные сценарии потери стабильности: переход структуры ядро-оболочка в бинарную наночастицу и распад наночастицы *A@B* на нанокластеры меньшего размера.

Результаты компьютерных экспериментов с использованием методов МК и МД позволяют рекомендовать использование процессов коалесценции и избирательной коррозии как способов получения биметаллических наночастиц со структурой ядро-оболочка.

Результаты исследований позволят учитывать условия формирования для получения наносплавов различной структуры и фазового состава.

5. **Конкретные рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации**

Полученные автором и приведенные в диссертации данные, а также выводы диссертации могут быть использованы в дальнейших исследованиях по установлению условий формирования бинарных наночастиц сплавов. Результаты диссертации позволят более гибко изучать специфические закономерности структурных и фазовых превращений в моно- и бинарных металлических наносистемах с использованием атомистического моделирования.

6. **Оценка содержания диссертации, ее завершенность, достоинства и недостатки**

Диссертационная работа выполнена и оформлена надлежащим образом: состоит из введения, четырех глав, основных результатов и выводов, перечня опубликованных статей по теме диссертации из перечня ВАК или индексируемых в базах Web of Science и Scopus, списка цитируемой литературы из 196 наименований. Диссертация изложена на 195 страницах, содержит 7 таблиц и 71 рисунок.

Во введении описаны актуальность и степень разработанности темы исследований, описаны объекты и предмет исследования, сформулированы цели и основные задачи диссертационной работы, представлены научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, методология и методы исследования. Описан личный вклад автора, приведены положения, выносимые на защиту, показаны обоснованность и достоверность полученных результатов. Работа апробирована на международных и

всероссийских научных конференциях. Приведено число публикаций и свидетельств о государственной регистрации программ на ЭВМ. Указано на соответствие диссертационной работы паспорту научной специальности.

В первой главе представлен обзор и анализ основных литературных источников, позволяющий оценить современное состояние исследований структурных и термодинамических характеристик бинарных металлических наночастиц.

Во второй главе описана методика проведения компьютерного эксперимента в бинарных металлических наночастицах.

Третья глава посвящена изучению закономерностей структурообразования в бинарных металлических наночастицах.

Четвертая глава содержит важные результаты по описанию процессов коалесценции и избирательной коррозии, которые могут быть использованы для синтеза биметаллических структур заданной конфигурации.

Завершается работа основными результатами и выводами.

Диссертация написана научным языком и содержит незначительное число опечаток.

Диссертационная работа Богданова С. С., несомненно, представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, в которой рассмотрен комплекс вопросов, связанных с применением компьютерного эксперимента для выявления закономерностей структурообразования в бинарных наночастицах. Полученные результаты могут быть использованы в экспериментальных работах, направленных на синтез бинарных наноструктур.

Однако к содержанию диссертационной работы имеется несколько замечаний:

1. Для решения отдельных задач в работе используются различные объекты исследования, а именно бинарные системы Au-Ag, Co-Au, Ni-Al. Однако, при постановке задач отсутствует обоснование выбора той или иной системы для решения указанной задачи. На основании каких данных проводился выбор

объектов исследования для решения указанных задач и в чем выражается комплексность полученных результатов при исследовании систем Au-Ag, Co-Au, Ni-Al?

2. В реальных экспериментах по получению бинарных наночастиц наблюдается образование структур как ядро-оболочка, так и янус-наночастиц. Вероятно, образование янус-наночастиц происходит вследствие разного поверхностного натяжения жидких металлов. В компьютерном эксперименте сценарий образования янус-наночастиц не рассматривался, что ограничивает использование выводов диссертации в экспериментальных исследованиях.

3. По мнению автора, внешнее давление можно рассматривать как один из основных параметров, управляющих процессом формирования структурно-фазового состава. При этом величина внешнего давления достигает нескольких ГПа. Однако не совсем понятно, в каких методах получения наночастиц используются такие высокие давления, а соответственно, насколько важен предложенный параметр управления.

4. В диссертации на основании компьютерного эксперимента показано, что в результате быстрого охлаждения бинарных наночастиц Ni-Al образуются биметаллические наноструктуры с никелевым ядром и оболочкой из атомов алюминия. Вместе с тем, никель и алюминий вступают в химическую связь и образуют сплавы (интерметаллиды) алюминида никеля (Ni_3Al и NiAl). Сомнительно, что быстрая закалка бинарных наночастиц Ni-Al способна предотвратить образование химических связей между никелем и алюминием.

Указанные замечания носят частный характер и не снижают общую ценность работы.

7. **Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней**

Диссертация представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, выполненную автором самостоятельно на высоком научно-методическом уровне, в которой на основании

выполненных автором исследований установлены закономерности и механизмы структурообразования, в т.ч. сегрегационных явлений в бинарных металлических системах. Следует отметить, что работа имеет существенное значение для физики конденсированного состояния. В диссертации получены новые научные результаты, которые могут быть использованы в практических целях для синтеза биметаллических наночастиц с новыми свойствами. Автореферат и опубликованные работы полностью и точно отражают содержание диссертации. Степень достоверности результатов работы, сделанных выводов и рекомендаций высока, поскольку работа выполнена с привлечением адекватных методов компьютерного эксперимента. Сама диссертация написана грамотным языком и аккуратно оформлена. Сформулированные в диссертации научные положения, выводы и рекомендации обоснованы.

На основании вышеизложенного можно сделать вывод, что по актуальности, научной новизне и практической значимости диссертационная работа «Закономерности структурообразования в бинарных наночастицах ГЦК металлов при термическом воздействии: атомистическое моделирование» полностью соответствует требованиям ВАК, а ее автор, Богданов Сергей Сергеевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Даю свое согласие на обработку персональных данных.

Официальный оппонент, д.т.н., зав. лабораторией физикохимии высокодисперсных материалов, г.н.с. Института физики прочности и материаловедения СО РАН, 634055, г. Томск, пр. Академический, д. 2/4, тел. (3822)492610, lerner@ispms.ru

Лернер Марат Израильевич