

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.2.411.03 НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «ТВЕРСКОЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» МИНИСТЕРСТВА НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

Аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение диссертационного совета от 26.05.2023 г. № 9

О присуждении Богданову Сергею Сергеевичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Закономерности структурообразования в бинарных наночастицах ГЦК металлов при термическом воздействии: атомистическое моделирование» в виде рукописи по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния принята к защите 22.03.2023, протокол № 6, диссертационным советом 24.2.411.03, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования РФ. Адрес: 170100, г. Тверь, ул. Желябова, 33. Приказ № 423/нк от 12.08.2013 г.

Соискатель – Богданов Сергей Сергеевич, 17 мая 1994 года рождения, в 2018 году окончил магистратуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» по направлению подготовки 03.04.02 Физика; в 2022 окончил аспирантуру федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия. В настоящее время работает младшим научным сотрудником Управления научных исследований федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре общей физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, доцент

Сдобняков Николай Юрьевич, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», кафедра общей физики, доцент.

**Официальные оппоненты:**

Лернер Марат Израильевич, доктор технических наук, заведующий лабораторией физикохимии высокодисперсных материалов ФГБУН «Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН»; Рогачев Александр Сергеевич, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник, заведующий лабораторией «Динамики микрогетерогенных процессов» ФГБУН «Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова РАН», дали положительные отзывы на диссертацию.

**Ведущая организация** - федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х.М. Бербекова», г. Нальчик, в своем положительном заключении, подписанном д.ф.-м.н., профессором Кармоковым Ахмедом Мацевичем, профессором кафедры электроники и цифровых информационных технологий Института информатики, электроники и робототехники и утвержденном д.х.н., профессором Хашировой Светланой Юрьевной, исполняющей обязанности проректора по научно-исследовательской работе, указала, что диссертация является научно-квалификационной работой, в которой с использованием атомистического моделирования установлены закономерности структурообразования в бинарных наночастицах ГЦК металлов при термическом воздействии, и соответствует требованиям пунктов 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года (в текущей редакции). Автор диссертации Богданов Сергей Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния.

**Соискатель имеет** 23 печатные работы, в том числе по теме диссертации опубликовано 12 работ в журналах, входящих в перечень ВАК и индексируемых в базах данных WoS и Scopus, а также получены 3 свидетельства о государственной регистрации программ на ЭВМ. Основные работы по теме диссертации:

1. Самсонов В.М., Сдобняков Н.Ю., Колосов А.Ю., Талызин И.В., Картошкин А.Ю., Васильев С.А., Мясниченко В.С., Соколов Д.Н., Савина К.Г., Веселов А.Д., Богданов С.С. О факторах стабильности/нестабильности биметаллических наноструктур ядро–оболочка // Известия РАН. Серия физическая. – 2021. – Т. 85. – № 9. – С. 1239-1244.

2. Bogdanov S.S., Samsonov V.M., Sdobnyakov N.Yu., et al. Molecular dynamics simulation of the formation of bimetallic core-shell nanostructures with binary Ni–Al nanoparticle quenching // Journal of Materials Science. – 2022. – V. 57. – I. 28. – P.13467-13480.

3. Талызин И.В., Богданов С.С., Самсонов В.М., Сдобняков Н.Ю., Григорьев Р.Е., Первиков А.В., Мишаков И.В. Идентификация сложных наноструктур ядро-оболочка по радиальным распределениям локальной плотности компонентов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2022. – Вып. 14. – С. 307-320.

Подготовка публикаций выполнена соискателем совместно с научным руководителем Н.Ю. Сдобняковым и соавторами. Результаты диссертационной работы полностью отражены в опубликованных работах, в частности, результаты компьютерных экспериментов по моделированию процессов структурообразования в бинарных наночастицах металлов с ГЦК структурой с различным размерным несоответствием атомов, а также описание процессов (коалесценция, избирательная коррозия), позволяющих синтезировать биметаллические наночастицы со структурой ядро-оболочка.

На диссертацию и автореферат поступило 8 отзывов, все отзывы положительные:

1. Арефьевой Л.П., д.ф.-м.н., доцента кафедры «Материаловедение и технологии материалов» ФГБОУ ВО «Донской государственный технический университет». Замечаний не содержит.

2. Гафнера Ю.Я., д.ф.-м.н., профессора, заведующего кафедрой математики, физики и информационных технологий ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университета им. Н.Ф. Катанова». Замечаний не содержит.

3. Замулина И.С., к.ф.-м.н., доцента, заведующего кафедрой программного обеспечения вычислительной техники и автоматизированных систем ФГБОУ ВО «Хакасский государственный университета им. Н.Ф. Катанова». Замечаний не содержит.

4. Иванова Ю.Ф., д.ф.-м.н., доцента, главного научного сотрудника лаборатории плазменной эмиссионной электроники ФГБУН «Институт сильноточной электроники СО РАН». Содержит следующее замечание: из прочтения автореферата непонятно, делалось ли автором сопоставление полученных при моделировании структур с экспериментально наблюдаемыми результатами.

5. Ларина С.В., к.ф.-м.н., заместителя директора по научной работе, заведующего лабораторией многомасштабного экспериментального исследования и моделирования полимерных композитов на основе перспективных термопластов для промышленного применения ФГБУН

«Институт высокомолекулярных соединений РАН». Содержит следующие вопросы и замечания: может ли в процессе коалесценции образовываться другая структура, кроме структуры ядро-оболочка при описанных условиях моделирования процесса избирательной коррозии? Следует пояснить различия в зависимости температуры кристаллизации наночастиц Au-Ag от их состава при N=800 от аналогичной зависимости при N=400 и наночастиц Au-Co.

6. Полухина В.А., д.ф.-м.н., заслуженного деятеля науки РФ, ведущего научного сотрудника лаборатории гетерогенных процессов и Курбановой Э.Д., к.х.н., научного сотрудника лаборатории гетерогенных процессов ФГБУН «Институт металлургии УрО РАН». Содержит следующие замечания: нет пояснения связи степени сегрегации с размером частиц; из автореферата не совсем ясна природа появления двух различных сценариев поведения концентрационных зависимостей температуры кристаллизации.

7. Борознина С.В., к.ф.-м.н., доцента, заведующего кафедрой судебной экспертизы и физического материаловедения ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный университет». Замечаний не содержит.

8. Чернышева А.П., д.ф.-м.н., доцента, старшего научного сотрудника ФГБУН «Институт химии твердого тела и механохимии СО РАН». Содержит замечания: температура кристаллизации золота на 250 К ниже экспериментального значения; не указано какие еще механизмы, кроме поверхностной и межзеренной диффузии рассматривались; не понятно, можно ли получить скорость закалки  $10^{12}$  К/с; имеются опечатки.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тем, что официальные оппоненты и работники ведущей организации являются известными специалистами по теме диссертации. В частности, в области моделирования металлических систем, а также экспериментальных исследований свойств бинарных и многокомпонентных металлических наночастиц.

**Диссертационный совет отмечает**, что выполненные соискателем исследования вносят вклад в представления о закономерностях структурообразования в бинарных наночастицах металлов с ГЦК структурой при термическом воздействии. Были **выявлены** закономерности сегрегационных явлений в бинарных металлических наночастицах; **предложены** способы (коалесценция и избирательная коррозия) получения биметаллических наночастиц со структурой ядро-оболочка и нанопористых структур; **обоснованы** закономерности формирования внутренней структуры бинарных металлических наночастиц.

**Теоретическая значимость** исследования состоит в том, что предложенный комплексный подход, сочетающий альтернативные методы

компьютерного моделирования (метод молекулярной динамики и метод Монте-Карло) для описания закономерностей структурообразования в бинарных металлических наночастицах, может быть использован для последующей разработки теоретических моделей термоиндуцируемых структурных превращений и прогнозирования физических свойств в более сложных по строению бинарных наносистемах, а также многокомпонентных наносистемах на основе рассматриваемых в работе металлов с ГЦК-структурой.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики** подтверждается тем, что выявленные закономерности и механизмы структурообразования имеют важное значение для совершенствования технологий синтеза бинарных наночастиц.

**Оценка достоверности** результатов исследования выявила: полученные автором результаты согласуются с теоретическими предсказаниями других авторов и имеющимися экспериментальными данными; автором использовались две независимо разработанные компьютерные программы, основывающиеся на применении метода изотермической молекулярной динамики и метода Монте-Карло, использующие в качестве межатомного потенциала хорошо апробированный потенциал сильной связи. Автором диссертации были предложены и апробированы модели параметризации для параметров потенциала сильной связи для рассматриваемых систем.

**Личный вклад соискателя** состоит в получении и анализе результатов моделирования процессов структурообразования в бинарных металлических наночастицах, состоящих из атомов разных размеров; в установлении и описании параметров, определяющих процессы структурообразования в бинарных металлических наночастицах; в изучении механизмов и условий спонтанного образования структур типа «ядро-оболочка», а также закономерностей и механизмов процессов коалесценции и избирательной коррозии, их взаимосвязи с закономерностями и механизмами спонтанной сегрегации; в подготовке количественных данных и иллюстративных материалов для публикаций по результатам проведенных исследований.

**В ходе защиты диссертации были высказаны критические замечания** о величине и способе моделирования внешнего давления в процессах структурообразования бинарных металлических наночастиц.

Соискатель Богданов С.С. ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы и привел собственную аргументацию алгоритма учета внешнего давления через введение дополнительной внешней силы, которая учитывается при решении уравнений движения в молекулярно-динамическом эксперименте. Кроме того, был приведен ряд литературных источников, обосновывающих величину используемого внешнего давления, а также содержащих алгоритмы-

аналоги по учету внешнего давления в молекулярно-динамическом эксперименте.

Диссертация соответствует критериям Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 в текущей редакции. На заседании 26.05.2023 г. диссертационный совет принял решение присудить Богданову Сергею Сергеевичу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния за описание закономерностей и механизмов структурных превращений в бинарных наносплавах и разработку подхода по идентификации процессов структурообразования, в том числе поверхностной сегрегации.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 12 человек, из них 6 докторов наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 15 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 11, против – 1, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель  
диссертационного совета

Пастушенков  
Юрий Григорьевич

Ученый секретарь  
диссертационного совета

Барабанова  
Екатерина Владимировна

26.05.2023 г.