

## Отзыв

на автореферат диссертации **Богданова Сергея Сергеевича** «Закономерности структурообразования в бинарных наночастицах ГЦК металлов при термическом воздействии: атомистическое моделирование», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. физика конденсированного состояния

Тема диссертационной работы Богданова С.С. безусловно актуальна с фундаментальной точки зрения, поскольку результаты исследований не просто расширяют наши представления о механизмах структурообразования в бинарных металлических нанокластерах, но автор также задается вопросом о влиянии физико-химических характеристик на структурные превращения таких наночастиц, что позволит получить бинарные наносплавы различной структуры и фазового состава. В качестве научной новизны стоит отметить реализацию комплексного подхода, включающего в себя использование двух альтернативных методов компьютерного моделирования: метода Монте-Карло и метода молекулярной динамики для изучения структурных превращений бинарных наночастиц. Так же достаточно оригинальным является использование комбинации двух этих методов для синтеза наночастиц заданной структуры. По результатам МД экспериментов с использованием потенциала сильной связи установлено, что в результате быстрого охлаждения (закалки) биметаллических наночастиц Ni-Al образуются биметаллические наноструктуры с оболочкой из атомов Al. Определено оптимальное значение начальной температуры ( $T_0 = 1000$  K) для процесса закалки. Использование данного значения позволяет обнаружить как выраженную поверхностную сегрегацию атомов Al, так и высокую скорость структурной перестройки наночастиц с исходным однородным распределением компонентов. При этом выбор более высокой температуры привел бы к уменьшению эффекта поверхностной сегрегации на этапе отжига, а более низкой – к замедлению процесса сегрегации как на стадии отжига, так и на стадии закалки. Диссертационная работа Богданова С.С. представляет интерес как с научной, так и с прикладной точек зрения: знание закономерностей плавления и кристаллизации наночастиц, необходимо как для разработки научно обоснованных подходов нанотехнологии, так и для прогноза поведения, в том числе стабильности наночастиц, наноструктур и наноструктурированных материалов.

По работе имеется ряд вопросов:

1. Почему степень сегрегации так связана с размером частиц (рисунки 2 и 7 автореферата)?
2. Из автореферата не совсем ясна природа появления двух различных сценариев поведения концентрационных зависимостей температуры кристаллизации (рисунок 3): зависимость с ярко выраженным минимумом и монотонно изменяющаяся зависимость.

Описанные замечания носят в большей степени уточняющий и дискуссионный характер и не влияют на общую положительную оценку работы. В целом диссертация Богданова С.С. представляет собой законченную научно-исследовательскую работу.

Результаты, полученные в диссертации, полностью отражены в публикациях автора, в том числе в журналах, вошедших в перечень ВАК РФ или индексируемых в МБД, а также прошли апробацию на международных и всероссийских конференциях.

Учитывая актуальность темы диссертации, новизну и практическую значимость её результатов, считаем, что данная работа в полной мере удовлетворяет требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям по физико-математическим наукам, а её автор Богданов С.С. заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. физика конденсированного состояния.

Даем согласие на обработку и передачу наших персональных данных, предоставляемых нами в диссертационный совет 24.2.411.03

Заслуженный деятель науки РФ  
Ведущий научный сотрудник лаборатории гетерогенных процессов,  
ФГБУН «Институт металлургии»  
Уральского отделения РАН,  
доктор физико-математических наук




Полухин Валерий Анатольевич

Научный сотрудник лаборатории гетерогенных процессов,  
ФГБУН «Институт металлургии»  
Уральского отделения РАН,  
кандидат химических наук

Курбанова Эльмира Джумшудовна

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт металлургии  
Уральского отделения Российской академии наук  
Почтовый адрес: 620016, Россия, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101  
Телефон: (343)232-91-14, e-mail: pvalery47@yandex.ru, kurbellya@mail.ru

Подписи В.А. Полухина и Э.Д. Курбановой подтверждаю:  
Ученый секретарь,  
ФГБУН «Институт металлургии»  
Уральского отделения РАН  
кандидат химических наук



Долматов А.В.