

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Сдобнякова Николая Юрьевича «Моделирование структурных превращений в однокомпонентных и многокомпонентных металлических наносистемах», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Создание и изучение свойств наночастиц как экспериментальными, так и теоретическими методами является, несомненно, актуальной задачей, интерес к которой продолжает неуклонно нарастать. Это обусловлено как чрезвычайно широким спектром практического применения различных наночастиц в качестве катализаторов, при создании композитных материалов, сенсоров, материалов для биологических и медицинских целей, так и с недостаточной изученностью многих вопросов, касающихся стабильности, закономерностей формирования и распада наночастиц. Без таких детальных исследований невозможно эффективное использование таких объектов в различных областях нанотехнологий. Очевидно, что свойства многокомпонентных наночастиц (в том числе металлических) будут критическим образом зависеть от состава их компонентов. Поэтому изучение таких многокомпонентных систем, несомненно, является актуальной самостоятельной задачей. На теоретическое исследование вышеуказанных нанообъектов и направлена диссертационная работа Н.Ю. Сдобнякова.

Среди наиболее интересных, на мой взгляд, результатов отмечу, что в диссертации разработан новый комплексный подход, сочетающий применение альтернативных методов атомистического моделирования (метод Монте-Карло и молекулярная динамика), дополненный термодинамическим моделированием. Данный подход позволил Н.Ю. Сдобнякову не только детально проанализировать внутреннюю структуру и

основные физико-химические параметры однокомпонентных металлических наночастиц, но и распространить такие исследования на область многокомпонентных металлических наночастиц. С использованием комплексного подхода найдены и проанализированы размерные зависимости термодинамических характеристик металлических наночастиц: температуры плавления и кристаллизации, теплоты (энтальпий) и энтропий фазовых переходов. Показано, что результаты, полученные с использованием альтернативных методов компьютерного моделирования и альтернативных силовых полей (потенциала сильной связи и метода погруженного атома) согласуются друг с другом. Впервые введено в рассмотрение и проанализировано понятие структурной сегрегации в монометаллических наночастицах, при которой формируются области, в которых существует одна определенная локальная кристаллическая структура. Установлено, что структурная сегрегация характеризуется наличием размерного эффекта, а сценарии структурообразования в бинарных металлических наночастицах в значительной степени определяются величиной размерного несоответствия атомов. На примере тернарного наносплава Ti_6Al_4V с малым содержанием атомов алюминия и ванадия показано, что некоторые закономерности структурообразования в многокомпонентных наночастицах могут быть «унаследованы» от соответствующих бинарных наносплавов. Показано, что в отличие от бинарных и тернарных наночастиц, в четырех- и пятикомпонентных наночастицах можно идентифицировать три типа атомов, участвующих в сегрегационных процессах: 1) атомы, проявляющие тенденцию к поверхностной сегрегации; 2) атомы, формирующие ядро наночастицы, а также ее периферийные области; 3) атомы, индифферентные к процессам сегрегации.

Результаты диссертации опубликованы в 96 статьях, входящих в перечень ВАК и/или индексируемых в международных базах данных Web of Science и Scopus, получены 7 свидетельств о государственной регистрации программ на ЭВМ, изданы 3 монографии. Результаты работы также апробированы на

большом количестве Всероссийских и международных конференций. Автор в своих исследованиях использовал современные теоретические подходы, а результаты представленных исследований согласуются с имеющимися экспериментальными данными.

Диссертация Сдобнякова Николая Юрьевича по своей актуальности, новизне, научной и практической значимости полностью соответствует критериям, установленным пп. 9-14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г. в редакции с изменениями, утвержденными постановлениями Правительства РФ №335 от 25 апреля 2016 г. и №426 от 20 марта 2021 г., а ее автор, Сдобняков Николай Юрьевич, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 - физика конденсированного состояния.

Даю свое согласие на обработку персональных данных диссертационному совету 24.2.411.03 (Д 212.263.09) при ФГБОУ ВО «Тверской государственной университет».

Заведующий кафедрой молекулярной биофизики и физики полимеров физического факультета Санкт-Петербургского государственного университета, доктор физико-математических наук специальность 01.04.14 - теплофизика и теоретическая теплотехника, физико-математические науки, профессор, член-корреспондент РАН
Цветков Николай Викторович
Адрес: 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7-9, СПбГУ
E-mail: n.tsvetkov@spbu.ru
тел. +7-(812)-363-62-20

15.05.2024