

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО  
ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**  
Федеральное государственное бюджетное  
учреждение науки

**ИНСТИТУТ МЕТАЛЛУРГИИ  
И МАТЕРИАЛОВЕДЕНИЯ  
им. А.А. Байкова  
Российской академии наук  
(ИМЕТ РАН)**

119334, Москва, Ленинский пр., 49  
Тел. (499) 135-20-60, 135-86-11; факс: 135-86-80  
E-mail: [imet@imet.ac.ru](mailto:imet@imet.ac.ru) <http://www.imet.ac.ru>  
ОКПО 02698772, ОГРН 1027700298702  
ИНН/КПП 7736045483/773601001

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИМЕТ РАН  
чл.-корр. РАН

\_\_\_\_\_ В.С. Комлев

«21» октября 2021 г

### ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу Васильева Сергея Александровича «Молекулярно-динамическое моделирование термоиндуцированных структурных превращений в наночастицах металлов подгруппы меди», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния

#### **Актуальность работы**

Диссертационная работа Васильева Сергея Александровича посвящена выяснению закономерностей и механизмов плавления и кристаллизации металлических наночастиц, прежде всего наночастиц металлов подгруппы меди, т.е. меди, золота и серебра, с использованием атомистического молекулярно-динамического (МД) моделирования и некоторых теоретических подходов, включая применение термодинамической теории подобия. Проанализировано влияние формы наночастиц, начальной структуры, поверхностного плавления и других факторов на плавление наноразмерных объектов. Основной областью применения таких частиц является порошковая металлургия, основанная на спекании наночастиц. Материалы, полученные спеканием металлических наночастиц, могут обладать уникальными механическими свойствами. Однако степень спекания и структура таких материалов существенно зависят от размера спекаемых наночастиц, их распределения по размерам, температуры спекания, температуры плавления, которая в свою очередь зависит от размера наночастиц. Таким образом, тема данной диссертационной работы и поставленные задачи исследования актуальны как с научной, так и прикладной точки зрения. В частности, величина приведенной температуры, т.е. ее отношения к температуре плавления наночастиц, определяет закономерности и механизмы процессов коалесценции и спекания. Как правило, полное слияние наночастиц (коалесценция) нежелательно как в порошковой металлургии, нацеленной на получение наноструктурированных материалов, так и в катализе, где спекание наночастиц может приводить к деградации катализаторов.

## **Научная новизна**

1. Проведено систематическое МД исследование плавления и кристаллизации наночастиц металлов Au, Ag и Cu размером до 200 000 атомов. Ранее подобные исследования проводились для меньших частиц.

2. Впервые в рамках единого комплексного исследования плавление и затвердевание металлических наночастиц использовались и сопоставлялись результаты, полученные с использованием двух принципиально разных типов многочастичных силовых полей: потенциала сильной связи и метода погруженного атома.

3. Впервые термодинамическая теория подобия была применена к наночастицам различных металлов. Были сопоставлены зависимости приведенной (безразмерной) температуры плавления от обратного приведенного диаметра наночастиц, полученные как с использованием формулы Томсона и экспериментальных значений межфазного натяжения, так и МД результатов автора. Было установлено, что одну группу подобия образуют наночастицы плотноупакованных металлов.

4. Вопреки имеющимся теоретическим моделям, предсказывающим скачкообразное плавление наночастиц размером меньше 7 нм, автором было установлено, что поверхностное плавление и другие связанные с ним явления наблюдаются при нагревании наночастиц любого размера.

5. Исследована и оценена вероятность возникновения особых структур с пентагональной симметрией при охлаждении нанокластеров металлов Au, Ag и Cu, содержащих до нескольких сотен атомов.

6. Проведенное сравнительное МД исследование плавления ГЦК-нанокристаллов и нанокластеров с пентагональной симметрией не выявило заметного влияния начальной структуры на плавление наночастиц Au.

7. Установлено, что плавление нанопроволок происходит по отличному от характерного для глобулярных наночастиц механизму: происходит потеря стабильности нанопроволоки, приводящая к ее разрыву и потере формы вплоть до превращения в глобулярную наночастицу.

## **Практическая значимость работы**

МД результаты по структурным превращениям в наночастицах позволяют более аккуратно спланировать проведение прямых экспериментов, связанных со спеканием нанопорошков или образованием наноструктур в металлах.

## **Достоверность результатов работы**

Достоверность полученных результатов обеспечивалась применением двух компьютерных программ. Она из них, программа LAMMPS – это программный комплекс, широко используемый исследователями по всему миру. Вторая программа CSEG была разработана в Тверском государственном университете, однако полученные с ее помощью результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными. В дополнение к методам атомистического моделирования, поставленные задачи исследования решались с использованием термодинамического моделирования, что также повышает степень достоверности полученных результатов.

### **Наиболее значимые результаты работы**

Автором получено достаточно большое число интересных научных результатов, однако, на наш взгляд наиболее значимыми для порошковой металлургии являются следующие:

1. Поверхностное плавление наблюдалось в наночастицах Au, Ag и Cu размером от 1 нм, то есть для частиц, меньших 7 нм, что не соответствует имеющимся теоретическим моделям.

2. Поверхностное плавление в этих наночастицах происходит в две стадии: сначала непрерывное плавление, отвечающее уменьшению кристаллического ядра частицы, а затем скачкообразный переход твердого ядра в жидкое состояние при достижении им определенного радиуса.

Очевидно, эти факторы должны учитываться при осуществлении спекания мелкодисперсных частиц.

### **Апробация работы**

Представленные в диссертационной работе результаты были получены в рамках выполнения 4 различных грантов, докладывались на 13 международных конференциях, проводившихся как в России, так и за рубежом, а также опубликованы в 17 статьях, из которых 15 в изданиях, индексируемых WoS и Scopus, в том числе входящих в Q1 и Q2 этих систем цитирования.

### **При рассмотрении представленной работы отмечен ряд замечаний:**

1. При обсуждении процессов плавления и кристаллизации наночастиц не уделено внимание видам химической связи между атомами в кристалле.

2. В главах 3 и 4 при обсуждении результатов МД моделирования не указано, с помощью каких программ получены обсуждаемые результаты.

3. В диссертационной работе много внимания уделено измерениям кристалличности наночастиц в процессе плавления, однако методика определения кристалличности не описана.

Сделанные замечания относятся к частным вопросам интерпретации результатов и не влияют на общую положительную оценку работы. Диссертация является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на высоком уровне, и содержит новые научно обоснованные результаты.

### **Заключение**

Рецензируемая диссертационная работа Васильева С.А. соответствует требованиям п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (в редакции, утвержденной постановлением Правительства РФ от 01.10.2018 № 1168), и предъявляемым ВАК РФ требованиям к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация соответствует специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния. Автореферат и опубликованные работы достаточно полно отражают ее содержание. Автор диссертации Васильев С.А. несомненно заслуживает присуждения искомой степени.

Диссертационная работа Васильева С.А. была рассмотрена и получила положительную оценку на заседании Секции «Металловедение и металлофизика» Учёного совета Института металлургии и материаловедения имени А.А. Байкова РАН (протокол №5/21 заседания Секции от 21 октября 2021 г).

Заместитель директора  
по научной работе ИМЕТ РАН

к.т.н.

Зав. Лабораторией конструкционных сталей и сплавов им. академика Н.Т. Гудцова ИМЕТ РАН  
Тел.: +7(499)135-77-92  
Эл.почта: [ibannykh@imet.ac.ru](mailto:ibannykh@imet.ac.ru)

Баннх Игорь Олегович