

## 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

Атомистическое моделирование структурных превращений в однокомпонентных и многокомпонентных металлических наносистемах является актуальной задачей физики конденсированного состояния. Сдобняковым Н. Ю. разработан комплексный подход, основанный на применении двух альтернативных методов атомистического моделирования: метода молекулярной динамики и метода Монте-Карло. Применение двух различных методов атомистического моделирования, а также различных потенциалов межатомного взаимодействия (потенциала сильной связи и потенциалов метода погруженного атома) позволило значительно повысить достоверность результатов моделирования.

Безусловным достоинством настоящей работы является использование нанотермодинамического метода для оценки влияния характерного размера на термодинамические свойства и стабильность однокомпонентных металлических наночастиц. В рамках нанотермодинамической модели плавления наночастиц с жидкой оболочкой диссертантом получено и блестяще проанализировано термодинамическое соотношение, описывающее зависимость температуры плавления от характерного размера наночастиц. Причем при расчетах было учтено влияние температуры на поверхностные и межфазные натяжения на границе между твердым телом и расплавом.

Автореферат диссертации соискателя Сдобнякова Н. Ю. безусловно показывает, что диссертация является новаторской и фундаментальной научной работой и представляет собой существенное научное достижение. Результаты, связанные с атомистическим моделированием процессов коалесценции и спекания как методов синтеза бинарных и многокомпонентных наночастиц, могут иметь большое практическое значение. Представленный в автореферате обширный список публикаций и апробации результатов диссертационного исследования доказывает весомый личный вклад диссертанта в развитие атомистического моделирования, основанного на отечественном ПО. Имеются следующие замечания.

1. Нанотермодинамическая модель плавления наночастиц с жидкой оболочкой давно известна. Учет температурных и размерных зависимостей поверхностных и межфазных натяжений в рамках этой модели был проведен, например, в работе

Z.-X. Cui, M.-Z. Zhao, W.-P. Lai, and Y.-Q. Xue Thermodynamics of Size Effect on Phase Transition Temperatures of Dispersed Phases. dx.doi.org/10.1021/jp2067364 | J. Phys. Chem. C 2011, 115, 22796–22803. Из автореферата не ясно в чем преимущество

предложенного диссертантом варианта метода «плавление с жидкой оболочкой».

2. Почему на рисунке 5 экспериментальные данные не совпадают с расчетными.

3. Процессы сегрегации в многокомпонентных системах требуют большего времени, чем в двухкомпонентных системах, рассмотренных в диссертации. Поэтому при одинаковой скорости охлаждения (заковки) сравнение многокомпонентных систем с двухкомпонентными системами кажется не совсем корректным.

Автореферат диссертанта хорошо написан, обладает внутренним единством и фактически является самостоятельной научной работой. Отдельные недостатки в автореферате и приведенные выше замечания не принципиальны и не влияют на высокую положительную оценку диссертационной работы. Оформление автореферата соответствует требованиям, устанавливаемым Высшей аттестационной комиссией Министерства образования и науки Российской Федерации. Судя по автореферату, диссертационная работа Сдобнякова Николая Юрьевича отвечает требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук в соответствии с «Положением о присуждении ученых степеней», утвержденным Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (в действующей редакции), а её автор, Н. Ю. Сдобняков, заслуживает присуждения учёной степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Доктор физико-математических наук,  
доцент, старший научный сотрудник  
ФГБУН «Институт химии твердого  
тела и механохимии СО РАН»

А.П. Чернышев

Контактные данные: Чернышев Альфред Петрович, д-р физ.-мат. наук, доцент, старший научный сотрудник, 630090, г.Новосибирск, ул. Кутателадзе 18, ФГБУН Институт химии твердого тела и механохимии Сибирского отделения Российской академии наук (ИХТТМ СО РАН),

**E-mail:** [secretary@solid.nsc.ru](mailto:secretary@solid.nsc.ru) **Сайт:** [solid.nsc.ru](http://solid.nsc.ru) Телефон: (383) 332-40-02 Факс: (383) 332-28-47

Я, Чернышев Альфред Петрович, даю свое согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета 24.2.411.03 (Д 212.263.09) и их дальнейшую обработку.

Подпись Чернышева А.П.  
подтверждаю



Ученый секретарь  
д.х.н.,  
Т.П. Шахтшнейдер

10.04.2024