

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 ДОКТОРА НАУК

Аттестационное дело № \_\_\_\_\_  
решение диссертационного совета от 24.05.2024 г. № 4.

О присуждении Сдобнякову Николаю Юрьевичу, гражданину РФ, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Моделирование структурных превращений в однокомпонентных и многокомпонентных металлических наносистемах» в виде рукописи по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния принята к защите 20.02.2024, протокол № 2, 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 – Сдобняков Николай Юрьевич, 1 марта 1977 года рождения, диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук «Размерная зависимость поверхностного натяжения наночастиц и проблема их термодинамической устойчивости» защитил в 2003 г. в диссертационном совете, созданном на базе государственного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Тверской государственный университет» (ныне действующее название – ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет») по специальности 01.04.07. - Физика конденсированного состояния, диплом КТ № 112552 от 16.01.2004 г. В настоящее время работает доцентом кафедры общей физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Диссертация выполнена на кафедре общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Научный консультант – заслуженный работник высшей школы Российской Федерации, доктор физико-математических наук, профессор Самсонов Владимир Михайлович, ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», профессор кафедры общей физики физико-технического факультета.

**Официальные оппоненты:** Полухин Валерий Анатольевич, доктор физико-математических наук, ФГБУН Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук, ведущий научный сотрудник лаборатории гидрометаллургии; Рогачев Александр Сергеевич, доктор физико-

математических наук, профессор, ФГБУН Институт структурной макрокинетики и проблем материаловедения им. А.Г. Мержанова Российской академии наук, главный научный сотрудник, заведующий лабораторией «Динамики микрогетерогенных процессов»; Твардовский Андрей Викторович, заслуженный работник высшей школы Российской Федерации, доктор физико-математических наук, профессор, ФГБОУ ВО «Тверской государственный технический университет», исполняющий обязанности ректора, заведующий кафедрой общей физики – 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 отзыве, утвержденном доктором технических наук, доктором экономических наук, профессором, исполняющим обязанности ректора Альтудовым Юрием Камбулатовичем и подписанном доктором физико-математических наук, доцентом, исполняющим обязанности заведующего кафедрой физики наносистем Института физики и математики Шебзуховой Мадией Азметовной, отметила, что диссертационная работа Н.Ю. Сдобнякова является оригинальной, самостоятельной и законченной научно-квалификационной работой, выполнена на актуальную тему, обладает научной новизной и практической ценностью, вносит существенный вклад в представления о закономерностях структурных превращений в однокомпонентных и многокомпонентных металлических наносистемах. Диссертация соответствует требованиям Положения «О порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года (в текущей редакции). Автор диссертации Сдобняков Николай Юрьевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

**Соискатель имеет** более 180 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 96 работ в рецензируемых научных изданиях, 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. Журнал «Нанотехника» входил в список рецензируемых журналов на момент выхода публикаций. В опубликованных работах полностью отражены результаты диссертации, описаны методы моделирования и подходы к исследованию локальной структуры наночастиц, результаты исследования и анализ структурных превращений в однокомпонентных и многокомпонентных металлических наносистемах. Подготовка публикаций проводилась лично автором, при участии соавторов совместных публикаций и научного консультанта д.ф.-м.н., проф. Самсонова В.М. В диссертации достоверно отражены сведения об опубликованных соискателем работах.

Наиболее значимыми являются следующие статьи:

1. **Сдобняков Н.Ю., Самсонов В.М., Базулев А.Н., Кульпин Д.А.** О размерной зависимости температуры плавления наночастиц // Известия РАН.

- Серия Физическая. – 2008. – Т. 72. – № 10. – С.1448-1450.
2. **Сдобняков Н.Ю.**, Комаров П.В., Соколов Д.Н., Самсонов В.М. Исследование термодинамических характеристик нанокластеров золота с использованием многочастичного потенциала Гупта // Физика металлов и металловедение. – 2011. – Т. 111. – № 1. – С. 15-22.
  3. **Сдобняков Н.Ю.**, Репчак С.В., Самсонов В.М., Базулев А.Н., Кульпин Д.А., Соколов Д.Н. О взаимосвязи размерных зависимостей температур плавления и кристаллизации наночастиц металлов // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2011. – № 5. – С. 109-112.
  4. Самсонов В.М., **Сдобняков Н.Ю.**, Бембель А.Г., Соколов Д.Н., Комаров П.В., Васильев С.А., Шакуло О.В. Комплексный подход к компьютерному моделированию плавления и кристаллизации нанокластеров золота // Вестник национального исследовательского ядерного университета «МИФИ». – 2013. – Т. 2. – №4. – С. 448-451.
  5. **Sdobnyakov N.Yu.**, Veselov A.D., Ershov P.M., Sokolov D.N., Samsonov V.M., Vasilyev S.A., Myasnichenko V.S. Size dependence of the entropies of melting and crystallisation of metal nanoparticles // Computational Materials Science. – 2018. – V. 153. – P. 153-158.
  6. Самсонов В.М., **Сдобняков Н.Ю.**, Мясниченко В.С., Талызин И.В., Кулагин В.В., Васильев С.А., Бембель А.Г., Картошкин А.Ю., Соколов Д.Н. Сравнительный анализ размерной зависимости температур плавления и кристаллизации наночастиц серебра: молекулярная динамика и метод Монте-Карло // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2018. – № 12. – С. 65-69.
  7. **Sdobnyakov N.Yu.**, Myasnichenko V.S., Cheng-Hung San, Yu-Tsung Chiu, Ershov P.M., Ivanov V.A., Komarov P.V. Simulation of phase transformations in titanium nanoalloy at different cooling rates // Materials Chemistry and Physics. – 2019. – V. 238. – Art. No 121895. – 9 p.
  8. **Sdobnyakov N.**, Khort A., Myasnichenko V., Podbolotov K., Romanovskaia E., Kolosov A., Sokolov D., Romanovski V. Solution combustion synthesis and Monte Carlo simulation of the formation of CuNi integrated nanoparticles // Computational Materials Science. – 2020. – V. 184. – Art. № 109936. – 12 p.
  9. Suliz K.V., Kolosov A.Yu., Myasnichenko V.S., Nepsha N.I., **Sdobnyakov N.Yu.**, Pervikov A.V. Control of cluster coalescence during formation of bimetallic nanoparticles and nanoalloys obtained via electric explosion of two wires // Advanced Powder Technology. – 2022. – V. 33. – I 3. – Art. № 103518. – 15 p.
  10. Bogdanov S., Samsonov V., **Sdobnyakov N.**, Myasnichenko V., Talyzin I., Savina K., Romanovski V., Kolosov A. 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.
  11. **Сдобняков Н.Ю.**, Колосов А.Ю., Соколов Д.Н., Савина К.Г., Базулев А.Н., Вересов С.А., Серов С.В. Комплексный подход к моделированию плавления и кристаллизации в пятикомпонентных металлических наночастицах: молекулярная динамика и метод Монте-Карло // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2023. – Вып. 15. – С.

589-601.

На диссертацию и автореферат поступило 9 отзывов, все отзывы положительные:

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

2. Борозниной Н.П., д.ф.-м.н., доцента, профессора кафедры судебной экспертизы и физического материаловедения ФГАОУ ВО «Волгоградский государственный университет». Замечаний не содержит.

3. Вербенко И.А., д.ф.-м.н., директора Научно-исследовательского института физики ФГАОУ ВО «Южный федеральный университет». Замечаний не содержит.

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

5. Иванова Ю.Ф., д.ф.-м.н., доцента, главного научного сотрудника лаборатории плазменной эмиссионной электроники ФГБНУ «Институт сильноточной электроники» Сибирского отделения Российской академии наук. Содержит замечания: из текста автореферата не понятно, делалось ли сопоставление полученных при моделировании структур с экспериментально наблюдаемыми, а также насколько применимы разрабатываемые подходы для моделирования многокомпонентных наночастиц экваторного состава (так называемых высокоэнтропийных сплавов).

6. Карташинской Е.С., д.х.н., старшего научного сотрудника отдела супрамолекулярной химии ФГБНУ «Институт физико-органической химии и углекислотной химии им. Д.М. Литвиненко». Замечаний не содержит.

7. Малашенко В.В., д.ф.-м.н., профессора, главного научного сотрудника ФГБНУ «Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина». Замечаний не содержит.

8. Цветкова Н.В., д.ф.-м.н., профессора, член-корреспондента РАН, заведующего кафедрой молекулярной биофизики и физики полимеров физического факультета ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет». Замечаний не содержит.

9. Чернышева А.П., д.ф.-м.н., доцента, старшего научного сотрудника ФГБНУ «Институт химии твердого тела и механохимии» Сибирского отделения Российской академии наук. Содержит замечания: о преимуществах рассматриваемого подхода по учету размерных зависимостей поверхностных и межфазных натяжений при изучении модели плавления наночастиц с жидкой оболочкой по сравнению с работой Cui Z.-X. et al. (2011) doi: 10.1021/jp2067364\$; о причинах расхождения расчетных и экспериментальных данных на рис. 5 автореферата; необходимости большего времени для процессов сегрегации в многокомпонентных системах по сравнению с двухкомпонентными системами, т.е. корректности применения одинаковых скоростей охлаждения (закалки).

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 экспериментального исследования и компьютерного моделирования физических характеристик и структуры металлических, бинарных и многокомпонентных наночастиц, а также применения методов термодинамики к наносистемам.

**Диссертационный совет отмечает**, что в результате выполненных соискателем исследований **разработан** комплексный подход, сочетающий применение атомистического и термодинамического моделирования для изучения структурных превращений в металлических наносистемах таких, как однокомпонентные металлические наночастицы, бинарные и многокомпонентные наносплавы; **предложены** методики нахождения размерных зависимостей термодинамических характеристик металлических наночастиц: температур плавления и кристаллизации, теплот (энтальпий) и энтропий указанных фазовых переходов; **показана** возможность распространения методов термодинамики на наноразмерные объекты как для прогнозирования размерных зависимостей термодинамических характеристик, так и для исследования проблемы их стабильности; **получены** закономерности структурной и поверхностной сегрегации для однокомпонентных (Au, Al, Co, Cu), бинарных (Au-Ag, Ti-Al, Ti-V, Ni-Cu) и многокомпонентных ( $Ti_6Al_4V$ , Au-Cu-Pd-Pt, Ag-Au-Cu-Pd-Pt) металлических наночастиц, а также предложено идентифицировать типы атомов по их сегрегационному поведению в многокомпонентных наносплавах.

**Теоретическая значимость** исследования обоснована тем, что автором разработан комплексный подход к исследованию металлических наносистем; детально **изложены** теоретические оценки коэффициента пропорциональности между поверхностной энергией и радиусом малого объекта с использованием имеющихся экспериментальных данных по скорости испарения металлических наночастиц и скорости усадки вакансионных пор; **раскрыты** особенности сценариев структурообразования в бинарных металлических наночастицах с разной величиной размерного несоответствия атомов, а в тернарных металлических наночастицах в зависимости от скорости их охлаждения; **изучен** механизм влияния внешнего давления на механическую стабильность наночастиц.

**Значение полученных соискателем результатов для практики** подтверждается тем, что: **определены** подходы к оценке размерных и температурных интервалов стабильности металлических наночастиц на основе данных по скорости их испарения и скорости усадки вакансионных пор; **создана** система рекомендаций для совершенствования технологий синтеза многокомпонентных наносплавов, обладающих существенной вариативностью свойств, на основе прогнозирования размерных эффектов и закономерностей структурообразования; **представлены** факторы, позволяющие управлять конечной структурой наночастиц в процессе их охлаждения.

Оценка достоверности результатов исследования **выявила: обоснованность** применения двух взаимодополняющих методов

атомистического моделирования, а также различных потенциалов межатомного взаимодействия (потенциала сильной связи и потенциалов метода погруженного атома); автором диссертации были предложены и апробированы модели расчета параметров потенциала сильной связи для рассматриваемых систем; результаты компьютерных экспериментов и следствия из них согласуются с имеющимися экспериментальными данными, результатами компьютерного моделирования, в том числе полученными альтернативными методами, в работах других авторов.

**Личный вклад автора** состоит в непосредственном участии во всех этапах выполненных исследований от постановки цели и задач до организации и проведения атомистического моделирования с использованием взаимодополняющих методов компьютерного эксперимента, проведения термодинамического моделирования, анализа полученных результатов, интерпретации отдельных экспериментальных данных и написания основных частей публикаций по результатам выполненных исследований при участии соавторов, вклад которых является вспомогательным.

**В ходе защиты диссертации были высказаны следующие критические замечания и вопросы:** 1) почему вы считаете, что формирование манжеты между двумя монометаллическими наночастицами, как результат моделирования коалесценции и спекания биметаллических наночастиц, происходит с использованием диффузионного механизма; 2) в чем суть предлагаемого комплексного подхода, сочетающего атомистическое и термодинамическое моделирование; 3) в чем заключается физический механизм сегрегации.

Соискатель Сдобняков Николай Юрьевич ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы и привел собственную аргументацию: 1) если проследить эволюцию системы во всем температурном интервале моделирования, например для наносистемы Ni-Cu, то можно установить взаимное проникновение атомов компонентов в зоне формирования манжеты; 2) применение двух различных методов атомистического моделирования в сочетании с термодинамическим моделированием позволяет проводить дополнительную верификацию результатов, а также выявлять артефакты, которые являются следствием используемого алгоритма того или иного метода моделирования; 3) считаю, что физический механизм сегрегации состоит в различии величины поверхностной энергии компонентов и размерном несоответствии атомов – это доминирующие факторы.

Диссертация соответствует критериям Положения «О порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 в текущей редакции.

На заседании 24.05.2024 г. диссертационный совет принял решение за научное достижение – разработку комплексного подхода, сочетающего применение атомистического и термодинамического моделирования для изучения структурных превращений в металлических наносистемах, его реализацию при последовательном переходе от изучения однокомпонентных металлических наночастиц к бинарным и многокомпонентным металлическим

наносплавам присудить Сдобнякову Николаю Юрьевичу ученую степень доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 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 – 13, против – нет, недействительных бюллетеней – 1.

Председатель  
диссертационного совета

Пастушенков  
Юрий Григорьевич

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
24.05.2024 г.

Барабанова  
Екатерина Владимировна