

### Отзыв

официального оппонента кандидата физико-математических наук, Сдобнякова Николая Юрьевича на диссертационную работу Шериевой Эльвиры Хусеновны «Влияние адсорбции компонентов на поверхностные свойства расплавов бинарных систем с устойчивыми химическими соединениями типа  $A_nB_m$ », представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

**Актуальность работы.** Диссертационная работа Шериевой Эльвиры Хусеновны посвящена исследованию влияния адсорбций устойчивых квазимолекулярных образований типа  $A_nB_m$  – продуктов химических взаимодействий основных компонентов бинарных металлических систем, на поверхностные свойства расплавов. Данная тема в литературе обсуждается давно. Были попытки аналитического описания свойств поверхностей, в частности, изотерм поверхностного натяжения (ПН) бинарных металлических расплавов. Однако из-за неопределенностей параметров, используемых в этих уравнениях, не удавалось достаточно точно описать поверхностные свойства бинарных расплавов, особенно когда основные его компоненты образуют устойчивые квазимолекулярные соединения. В литературе не было достаточно четкого и точного представления о влиянии продуктов химических реакций основных компонентов на свойства расплавов. Таким образом, является безусловным актуальность темы диссертационной работы как с фундаментальной, так и прикладной точек зрения, в том числе в связи с перспективами применения описанных результатов для прогнозирования и описания изотерм поверхностного натяжения бинарных металлических расплавов.

**Степень обоснованности научных положений и выводов.** Научные положения и выводы, на которых базируются расчеты поверхностных свойств расплавов, получены в основном из анализа и обобщения результатов экспериментальных изотерм ПН и не противоречат существующим теоретическим представлениям.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, выводов, списка использованной литературы и изложена на 166 страницах.

**Во введении** показана актуальность разрабатываемой темы, цель диссертационной работы и вытекающие из нее задачи, научная новизна, основные положения, выносимые на защиту, теоретическая и практическая значимость работы, степень достоверности полученных результатов, новизна и защищаемые положения, личный вклад автора, приведены сведения об апробации результатов работы и публикациях.

**В первой главе** диссертации представлен достаточно полный обзор литературы по разрабатываемой теме. В ней показаны недостатки теоретических работ, проводится анализ экспериментальных работ, из которого следуют основные и достаточно обоснованные выводы и заключения, на которых базируются предлагаемые методики расчетов поверхностных свойств расплавов. Здесь автору удалось показать, что можно выделить четыре типа простейших изотерм ПН, остальные, более сложные, можно представить в виде комбинаций этих простых изотерм ПН. Далее автор показывает, что наиболее надежным и удачным в практическом использовании уравнением изотермы ПН является, предложенное в 2012 году уравнение

$$\sigma(x) = \beta \frac{(F-1)(1-x)x}{1+(F-1)x} + \sigma_A(1-x) + \sigma_B \cdot x. \quad (1)$$

Главным достоинством уравнения (1) является то, что оно получено из анализа и обобщения экспериментальных изотерм ПН и дает результаты, близкие к реальным, а его неизвестные параметры  $\beta$  и  $F$  вычисляются прямо из данных экспериментов.

**Во второй главе** представлены некоторые **новые положения**, на которые базируются расчеты свойств поверхности. Перечислим лишь некоторые из них:

- уравнение (1) можно представить в линейном виде и это позволяет доказать справедливость (1) для всех монотонных изотерм ПН. Уравнение дает еще один способ определения параметров  $\beta$  и  $F$ .

- при различных приближениях из (1) можно получить уравнения Фолькмана для идеальных растворов и уравнение Прилежаева-Дефай для регулярных растворов.

- уравнение (1) описывает экспериментальные изотермы ПН с высокой точностью во всей области составов, независимо от степени идеальности системы.

- существуют четыре вида простейших монотонных изотерм ПН, остальные – более сложные, являются комбинациями этих простых изотерм ПН.

- для аналитического описания сложной экспериментальной изотермы ПН бинарной системы, основную систему  $A-B$  с устойчивыми химическими соединениями  $A_nB_m$ ,  $A_kB_l$  следует разбить на составляющие вторичные системы:  $A-A_nB_m$ ,  $A_nB_m-A_kB_l$ ,  $A_kB_l-B$  и описать изотерму каждой вторичной системы уравнением (1).

**В третьей главе** приведены результаты **практического применения** (1) при расчетах изотерм ПН бинарных систем с устойчивыми химическими соединениями. Показано, что причиной резкого изменения ПН является

появление в системе квазимолекулярных соединений, устойчивых при температурах измерений ПН.

**Четвертая глава** посвящена расчетам адсорбции и состава поверхности расплавов бинарных систем, выявлению роли молекул устойчивых химических соединений типа  $A_nB_m$  в формировании поверхностных свойств расплавов. В частности был проведен расчет адсорбций основных компонентов и продуктов химических реакций, а также расчет составов поверхностного слоя расплавов бинарных систем, в которых образуются квазимолекулы устойчивых химических соединений или группировки атомов. Отмечается, что расчеты адсорбций и составов поверхностного слоя в приближении реальных растворов впервые стали возможными благодаря использованию точных формул В.К. Семенченко и разработке **новой методики** определения параметров  $\beta$  и  $F$ .

В качестве перспектив развития данной диссертационной работы указывается, что уравнение изотермы поверхностного натяжения может быть использовано для аналитического описания изотерм ПН бинарных систем с устойчивыми химическими соединениями типа  $A_nB_m$ , что имеет важное значение для разработки методики целенаправленной модификации поверхностей расплавов бинарных систем. Для описания изотерм ПН с учетом распада части молекул  $A_nB_m$ , по-видимому, расплавы до химического соединения (и после) должны быть рассмотрены как квазитрехкомпонентные, состоящие из компонентов  $A$ ,  $B$  и  $A_nB_m$ . Отмеченные выше методики и результаты могут быть использованы в качестве самостоятельных справочных материалов, а также послужить руководством по технологическому внедрению методики оценки и прогнозирования поверхностных свойств расплавов бинарных систем с устойчивыми химическими соединениями типа  $A_nB_m$ .

**Достоверность научных результатов диссертации** обусловлена следующим. Во-первых, согласованностью результатов с данными расчетов других авторов и результатами экспериментов, согласованностью предлагаемых теоретических выкладок с существующими теоретическими положениями. Во-вторых, применение апробированных физических и математических методов исследования, обработки, анализа и обобщения данных.

Основные результаты диссертации были опубликованы в ведущих журналах и прошли **достаточную апробацию**. Содержание диссертации полностью отражено в диссертации опубликованных 29 печатных работ, в том числе 9 работ в журналах, рекомендованных ВАК РФ и две статьи, индексируемых международными системами цитирования Scopus и Web of

Science. Результаты докладывались на ряде Международных научно-технических конференциях и симпозиумах.

**Автореферат** полностью отражает содержание диссертационной работы.

По диссертационной работе имеются следующие **замечания и вопросы:**

1. В обзоре данной диссертационной работы недостаточное внимание уделено иностранным источникам, а также методикам компьютерного эксперимента, которые в настоящее время очень бурно развиваются.

2. Описанный в диссертации результат, что для аналитического описания сложной экспериментальной изотермы ПН бинарной системы, основную систему  $A-B$  с устойчивыми химическими соединениями  $A_nB_m$ ,  $A_kB_l$  следует разбить на составляющие вторичные системы:  $A-A_nB_m$ ,  $A_nB_m-A_kB_l$ ,  $A_kB_l-B$  и описать изотерму каждой вторичной системы уравнением (1). Однако автор никаким образом не оценивает возможную погрешность такого подхода.

3. С. 115 диссертации указывается, что соотношения (4.1.7) - (4.1.10) могут быть успешно использованы для расчетов адсорбции компонентов  $B$  расплавов бинарных систем  $A-B$  в случае монотонного изменения поверхностного натяжения в зависимости от состава. Однако возможны ситуации немонотонного поведения, например, для наноразмерных объектов. Для подобного случая можно ли адаптировать описанный подход?

4. В работе не даются пояснения о значительном превышении значения параметра  $F \gg 1$  для системы  $Ag-Ag_2Te$  от наблюдаемого значения для большинства исследованных систем  $F=1\div 3$ .

5. Было бы интересным провести исследование корреляции между значениями параметров  $\beta$  и  $F$ , вычисляемых непосредственно из данных экспериментов на большой выборке как по числу систем, так и по числу составов.

6. В диссертации и автореферате подчеркивается, что сильное химическое взаимодействие компонентов  $A$  и  $B$  бинарной системы  $A-B$  приводит к особенностям (изломы, точки перегиба, разрыв производной  $(\partial\sigma/\partial x)_{p,T}$ , экстремумы (максимум, минимум)) на изотермах ПН. Указывается и причина подобного поведения – образование химических соединений типа  $A_nB_m$ , атомных группировок  $A_iB_j$ , кластеров  $A_i$  или  $B_j$  и других КМО. Все ли причины могут реализовываться в одной бинарной системе  $A-B$  или обычно есть доминирующий механизм?

Несмотря на высказанные вопросы и замечания, которые носят уточняющий характер, диссертационная работа Шериевой Э.Х. является законченным исследованием. Приведенные замечания не изменяют общей

положительной оценки диссертационной работы и не снижают ценность полученных в данной работе результатов.

### **Заключение**

Диссертационная работа Шериевой Эльвиры Хусеновны «Влияние адсорбции компонентов на поверхностные свойства расплавов бинарных систем с устойчивыми химическими соединениями типа  $A_nB_m$ », выполнена на актуальную тему и является законченной научно квалификационной работой, выполненной соискателем самостоятельно. Сформулированные в диссертации новые научные положения, выводы и заключения обладают новизной, достоверны и достаточно обоснованы. Диссертационная работа отвечает требованиям пунктов 9-14 Постановления Правительства РФ от 24 сентября 2013г. №842 «О порядке присуждения ученых степеней», а ее автор, Шериева Эльвира Хусеновна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:

кандидат физико-математических наук,  
доцент кафедры общей физики ФГБОУ ВО  
«Тверской государственный университет»  
«до» ноября 2020 г.



Н.Ю. Сдобняков

Рабочий адрес: 170002, Тверь, Садовый пер., 35, ауд. 217  
Телефон: (4822) 58-14-93, доб. 106  
e-mail: nsdobnyakov@mail.ru

Подпись к.ф.-м.н., доцента Сдобнякова Н.Ю. удостоверяю.  
И.о. ректора \_\_\_\_\_ Л.Н. Скаковская

