

ОТЗЫВ официального оппонента
о диссертации на соискание ученой степени доктора
физико-математических наук
ЛХАМСУРЭНА ЭНХТОРА на тему:
“Ближний порядок и статические смещения в бинарных
поликристаллических твердых растворах замещения с различными
кристаллическими структурами”

по специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния

Диссертация Лхамсурэна Энхтора посвящена развитию методов исследования ближнего порядка в двойных сплавах замещения методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ). Для достоверного определения параметров ближнего порядка в исследуемых сплавах автором развит метод учета и оценки статических смещений атомов из положений “средней решетки” сплава, обусловленных размерным эффектом. Верификация экспериментальных значений параметров ближнего порядка проведена расчетами энергий упорядочения с применением уравнений статистической теории упорядочения, а также оценками критических температур фазового перехода порядок-беспорядок в исследуемых сплавах. В работе применена теория псевдопотенциала в теоретических расчетах энергии парного взаимодействия, силовых постоянных и модулей упругости сплавов, а также в расчетах энергий упорядочения сплава с учетом статических смещений атомов. Диссертационная работа представляет целостную систему научного исследования ближнего упорядочения в двойных сплавах замещения с различными кристаллическими структурами.

Актуальность работы определяется тем, что ближний порядок в расположении атомов компонент металлических твердых растворов

обуславливает прочность, электросопротивление, термо-эдс, гальваномагнитные и магнитные свойства, определяющие применение сплавов на практике. В настоящее время в аэрокосмической области, приборостроении, ортопедии актуальной задачей является создание сплавов с особыми физическими свойствами. Результаты фундаментальных исследований физики сплавов применяются в материаловедении и нанотехнологии.

Новизна. Впервые в исследовании ближнего порядка в двойных сплавах замещения методом ДРРЛ учтен вклад, обусловленный статическими смещениями атомов, путем расчета амплитуд волн статических смещений с применением силовых постоянных межатомного взаимодействия.

Впервые проведена оценка статических смещений атомов на дальних координационных сферах из интенсивности рассеяния рентгеновских лучей поликристаллическим сплавом.

Впервые проведен факторный анализ в методе определения параметров ближнего порядка из интенсивности рассеяния рентгеновских лучей путем построения модулирующих функций ближнего порядка.

Получены новые выражения для динамических матриц объемно-центрированной кубической (ОЦК), гранецентрированной кубической (ГЦК) и гексагональной плотноупакованной (ГПУ) структур в рамках модели Де Лане, из которых в длинноволновом приближении получены выражения для расчетов модулей упругости металлов и сплавов с ОЦК, ГЦК и ГПУ структурами, которые позволяют рассчитать модули упругости теоретически или оценить их из экспериментальных фононных спектров.

Развита методика определения параметров ближнего порядка на дальних координационных сферах ГПУ сплава из интенсивности ДРРЛ с различением на сферах с практически одинаковыми радиусами.

Личный вклад соискателя состоит в получении выражений для динамических матриц, модулей упругости, Фурье-образов квазиупругих сил и критических температур фазовых переходов. Автор разработал и применил в исследованиях ближнего порядка сплавов метод оценки статических смещений из интенсивности ДРРЛ с применением значений силовых постоянных межатомного взаимодействия. Проведена обработка имеющихся в литературе экспериментальных фононных спектров металлов с ОЦК и ГЦК структурами и последующая оценка силовых постоянных. Экспериментальная часть диссертационной работы проведена при непосредственном участии и определяющем вкладе автора, что в полной мере отражено в публикациях и в апробации работы. Теоретические расчеты методом псевдопотенциала проведены автором на персональном компьютере с помощью авторских программ на языке Фортран.

Представленная диссертация состоит из введения, девяти глав, основных результатов и выводов, четырех приложений, содержит 263 страниц текста, включает 42 рисунка и 68 таблиц. Список литературы включает 281 наименований. Список основных работ автора по теме диссертации состоит из 36 наименований, включая 23 работы в журналах, в индексируемых базах данных Web of Science, Scopus и РИНЦ и соответствует требованиям ВАК Российской Федерации на соискание ученой степени доктора физико-математических наук.

Введение содержит сведения об актуальности исследования, степени разработанности темы исследования, целях и задачах, объекте исследования, научной новизне, достоверности результатов исследований, теоретической и практической значимости, методологии исследования, положений, выносимых на защиту и апробации результатов.

Глава I посвящена описанию метода флуктуационных волн и определению параметра ближнего порядка, обзору уравнений статистической теории упорядочения. В разделе 1.3 дан обзор исследований ближнего порядка в двойных монокристаллических и поликристаллических сплавах замещения. В разделе 1.4 описана методика расчета энергий упорядочения в двойных сплавах замещения методом псевдопотенциала и дан обзор соответствия результатов теоретических расчетов и экспериментальных данных.

Глава II содержит обзор методик учета статических смещений в интенсивности диффузного рассеяния поликристаллическими и монокристаллическими двойными сплавами и результатов их применений. Описана методика исключения побочных компонентов из интенсивности диффузного рассеяния поликристаллическими сплавами, которая применялась в диссертационной работе.

Глава III посвящена динамике кристаллической решетки и расчетам силовых постоянных и модулей упругости, которые применяются в расчетах амплитуд волн статических смещений из уравнений, связывающих динамические матрицы и Фурье-образы квазиупругих сил. В разделах 3.1 и 3.2 представлены выражения для динамических матриц и модулей упругости в моделях Борна-Кармана и Де Лане. В разделе 3.3 даны методика расчетов силовых постоянных и модулей упругости металлов и сплавов методом псевдопотенциала и обзор результатов ее применения. В разделах 3.4 и 3.5 даны новые выражения динамических матриц и модулей упругости, и результаты их применений в расчетах модулей упругости металлов и сплавов с ГЦК, ОЦК и ГПУ структурами (защищаемое положение 3). В разделе 3.6 новые выражения динамических матриц апробированы в обработке экспериментальных фононных спектров металлов с различными кристаллическими структурами.

Глава IV содержит результаты исследования ближнего порядка в сплавах Ni-W, Ni-Pt и Ni-Ir с ГЦК структурой, в которых учет статических смещений проводился через значения модулей упругости сплава или матрицы сплава. В случае сплава Ni-6 ат. %W экспериментально определены параметры ближнего порядка и проведен теоретический расчет устойчивости кристаллической структуры методом псевдопотенциала. В разделе 4.4 на примере сплава Ni-13.1 ат. %W проведен факторный анализ метода определения параметров ближнего порядка из интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей. Показано, что расчетами модулирующих функций ближнего порядка с учетом статических смещений с применением модулей упругости сплава можно достоверно оценить параметры ближнего порядка на первых четырех-пяти координационных сферах (**защищаемое положение 1**). Изучением ближнего порядка в сплаве Ni-1.6 ат. %W показано, что имеется возможность достоверного определения параметров ближнего порядка в разбавленных сплавах (**защищаемое положение 1**). **Глава V** содержит результаты исследования ближнего порядка в ОЦК сплавах в сплавах Fe-3, 5, 7 ат.% Re и Fe-2.5, 25.0 ат.%Rh. (**защищаемое положение 1**).

Глава VI содержит результаты исследования ближнего порядка в сплавах системы медь-золото с различными составами. Показано, что расчетами энергий упорядочения сплавов Cu-Au с применением экспериментальных значений параметров ближнего порядка можно достоверно оценивать критические температуры фазового перехода порядок-беспорядок и уточнять фазовые диаграммы равновесия двойных систем (**защищаемое положение 4**).

В **Главе VII** представлено исследование ближнего порядка в сплаве Mg-10 ат. %In с гексагональной плотноупакованной структурой с учетом статических смещений методом флуктуационных волн в модели Борна–Бегби.

В результате определены параметры ближнего порядка на первых десяти координационных сферах с различием первой и второй, пятой и шестой сфер с близкими радиусами (защищаемое положение 1).

В Главе VIII изложены результаты изучения ближнего порядка в сплавах Ni-13.1 ат. % W, Ni-14 ат. % Ir, Fe-5 и 9 ат. % Re, Mg-10 ат. % In методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей при микроскопическом учете статических смещений с применением силовых постоянных межатомного взаимодействия. Показано, что совместно с изучением ближнего порядка возможны оценки статических смещений атомов сплава из интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей (защищаемое положение 2).

В Главе IX представлены результаты расчетов энергий упорядочения и параметров ближнего порядка сплавов Cu-25 ат. % Au, Ni-14 ат. % Pt, Ni-22.5 ат. % Fe и Ni-11 ат. % Cr методом псевдопотенциала с учетом размерного эффекта (защищаемое положение 5).

Диссертация Л. Энхтора представляет собой завершенное системное изложение методов и результатов многолетних исследований, продолжающих развитие работ профессоров Физического факультета Московского государственного университета В.И. Ивероновой, А.А. Кацнельсона и В.М. Силонова. Все защищаемые положения работы обоснованы и доказаны. Достоверность результатов исследований подтверждается использованием общепринятых моделей, строгих математических методов и соответствием результатов численных расчетов с данными физических экспериментов, а также с результатами теоретических расчетов, полученными в работах других авторов.

Полученные в диссертационной работе результаты являются основой уточненных теоретических и экспериментальных методов исследования параметров ближнего порядка в сплавах с ОЦК, ГЦК и ГПУ структурами и

могут применяться в научно-исследовательских и производственных организациях: при создании сплавов с особыми физико-химическими свойствами, и для уточнения фазовых диаграмм двойных сплавов. Развитая методика при соответствующей адаптации применима в исследованиях кристаллических структур, проводимых в Лаборатории нейтронной физики Объединенного института ядерных исследований. Основные результаты работы опубликованы в научных статьях, указанных в автореферате и диссертации. Автореферат адекватно отражает содержание диссертации.

Имеются следующие замечания и рекомендации:

1. Одной из целей диссертационной работы является учет статических смещений в интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей исследуемыми сплавами. Однако в работе в явном виде не показана модуляция диффузного рассеяния, обусловленная статическими смещениями атомов сплава. В этом аспекте, только в случае сплава Ni-13.1 ат. % W показано искажение модулирующей функции ближнего порядка в результате учета статических смещений атомов сплава.
2. В Главе IX расчетами энергий упорядочения сплавов Ni-22.5at.%Fe и Ni-11 ат.%Cr методом модельного потенциала с учетом вклада статических смещений оценены смещения индивидуальных пар атомов Ni-Ni, Fe-Fe, Cr-Cr. Однако не проведено обсуждение результатов этих оценок и отсутствует сравнение с соответствующими экспериментальными данными.
3. В некоторых точках на картинах диффузного рассеяния рентгеновских лучей, изучаемыми сплавами, заметны небольшие разбросы интенсивности, видимо, обусловленные сравнительно малой интенсивностью рассеянного рентгеновского излучения. Для уменьшения таких погрешностей в дальнейших исследованиях может быть целесообразным применение линз.

для рентгеновских лучей, которые фокусируют и повышают интенсивность излучения, измеряемого детектором.

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют значимости диссертационного исследования. Совокупность развитых в диссертационной работе подходов, методов и полученных с их помощью результатов можно квалифицировать научное достижение в области физики сплавов, связанное с решением проблемы определения типа ближнего упорядочения в бинарных сплавах методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей, и рекомендовать их к публикации в виде монографии.

Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует специальности 1.3.8. физика конденсированного состояния (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, а также оформлена согласно требованиям Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени доктора наук Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Таким образом, соискатель **Лхамсурэн Энхтор** заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:

доктор наук физико-математических наук, профессор,
ведущий научный сотрудник, Лаборатории теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова, Международной межправительственной научно -

исследовательской организации “Объединенный институт ядерных исследований”

ВИНИЦКИЙ Сергей Ильич

02.04.2025 г.

Контактные данные:

тел.: , e-mail:

Специальность, по которой официальным оппонентом
защищена диссертация:

01.04.02 – теоретическая физика, физико-математические науки

Адрес места работы:

141980, Московская область, г. Дубна, ул. Жолио Кюри, д.6,

Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова,

Международная межправительственная научно-исследовательская
организация “Объединенный институт ядерных исследований”

Тел.: 8(496)2163348; e-mail: vinitsky@theor.jinr.ru

Подпись сотрудника Лаборатории теоретической физики (ЛТФ) им. Н.Н.
Боголюбова, Международной межправительственной научно-
исследовательской организации “Объединенный институт ядерных
исследований (ОИЯИ)” С.И. Веницкого

удостоверяю:

ученый секретарь ЛТФ ОИЯИ

Андреев А.В.

02.04.2025 г.