

ОТЗЫВ
официального оппонента на диссертацию
Лхамсурэн Энхтора на тему
«Ближний порядок и статические смещения в бинарных
поликристаллических твердых растворах замещения с различными
кристаллическими структурами», представленную на соискание ученой
степени доктора физико-математических наук
по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния»

Ближний порядок в расположении атомов играет важную роль в физике кристаллов и его изучению посвящено значительное количество работ. Существенный прогресс в этой области достигнут в Советской, Российской и Украинской школах по кристаллофизике. Работа Лхамсурэн Энхтора развивает это направление.

Изучение ближнего порядка (БП) в поликристаллах представляет собой актуальную задачу физики конденсированного состояния. В 21 веке технологии позволяют получать новые двойные сплавы, БП в которых нуждается в изучении. Теория БП в кристаллах до настоящего времени не закончена, поэтому изучение БП – актуальная задача физики конденсированного состояния.

Хотя за последние десятилетия предпринимались попытки уточнения уравнений, связывающих энергии упорядочения с параметрами ближнего порядка (ПБП), эта задача все еще остается актуальной. С другой стороны, проблема прогноза существования БП через значения энергий упорядочения, которые можно рассчитать теоретическими методами, не решена. Для одной трети всех изученных двойных сплавов на предмет выявления БП не удастся корректно прогнозировать методом модельного потенциала. В связи с этим работа Лхамсурэн Энхтора является актуальной.

Цель работы Лхамсурэн Энхтора состояла в развитии экспериментальных и теоретических методов определения ПБП в поликристаллических сплавах с ОЦК, ГЦК и ГПУ структурами. Достижение этой цели потребовало решения следующих задач:

1. Усовершенствование экспериментального метода диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ) для определения ПБП в двойных поликристаллических сплавах с учетом вклада статических смещений атомов.

2. Развитие метода расчета амплитуд волн статических смещений атомов компонент сплава с применением динамической матрицы и Фурье-образов квазиупругих сил межатомного взаимодействия.

3. Развитие методик расчетов силовых постоянных межатомного взаимодействия и модулей упругости на основе метода псевдопотенциала. Разработка методики оценки силовых постоянных и модулей упругости металлов и сплавов из экспериментальных данных фононных спектров с применением выражений динамических матриц.

4. Развитие методики расчета энергий упорядочения через экспериментальный спектр ПБП. Апробация уравнений Каули и Кривоглаза-Клэппа-Мосса для оценки температур **фазового перехода порядок-беспорядок** (ФППБ) с использованием экспериментальных значений ПБП.

5. Усовершенствование методики прогноза БП в двойных сплавах замещения в рамках метода псевдопотенциала с учетом статических смещений атомов, обусловленных размерным эффектом.

Структура и объём диссертации

Текст диссертации состоит из введения, девяти глав, списка литературы, основных результатов и выводов и четырех приложений. Объём диссертации составляет 261 страниц, включает 42 рисунка и 68 таблиц. Список литературы включает 281 наименований.

Во Введении обоснована актуальность исследования, сформулирована цель и задачи диссертационной работы. Приведены научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы, достоверность и степень обоснованности научных результатов, сформулированы основные положения, выносимые на защиту, и методология исследования. Также определен личный вклад автора.

В первой обзорной главе изложен метод флуктуационных волн, даны определения параметров корреляции и ПБП. Описаны основные уравнения статистической теории БП в сплавах замещения, связывающие ПБП и энергии упорядочения. Приведен обзор исследований БП в моно- и поликристаллических бинарных сплавах.

Отмечено, что наибольший прогресс в статистической теории БП достигнут **в модели парного взаимодействия атомов**. Однако с середины прошлого века известно, что в металлах существуют многочастичные (трех и четырехчастичные) взаимодействия атомов, что отмечено в монографии М. Борна и Х. Куня, ссылка на которую есть в диссертации. Многочастичным энергиям диссертант не уделил должного внимания.

Вторая (обзорная) глава посвящена теории диффузного рассеяния, применявшейся в определении ПБП с учетом статических смещений атомов в поликристаллических и монокристаллических неупорядоченных твердых растворах. Изложена теория Кривоглаза М.А. и сформулированы задачи данной работы, решение которых позволит разработать методы учета статических смещений атомов и определения на этой основе ПБП.

В третьей главе рассмотрены приближения Борна-Кармана и де Лане, получены необходимые выражения динамических матриц и модулей упругости для ОЦК, ГЦК и ГПУ структур, а также проведены расчеты модулей упругости некоторых металлов и сплавов методом модельного потенциала. Предложена методика оценки силовых и модулей упругости ГЦК и ОЦК металлов из экспериментальных данных фононных частот.

В четвертой главе представлены результаты исследований БП в поликристаллических сплавах Ni-W, Ni-Ir и Ni-Pt. Несмотря на широкое исследование БП сплавов на основе никеля методами ДРРЛ и рассеяния нейтронов, в них не в полной мере учитывался размерный эффект, что приводит к потере достоверности получаемых значений ПБП. Для учета размерного эффекта применялся метод флуктуационных волн Кривоглаза

М.А. Наряду с экспериментальным исследованием диссертант провел расчеты энергий упорядочения сплавов NiW методом псевдопотенциала.

Пятая глава посвящена исследованию БП в сплавах Fe-3, 5, 7 ат.% Re и Fe-2.5, 25.0 ат.%Rh методом ДРРЛ с учетом статических смещений атомов методом флуктуационных волн в модели Борна-Бегби. С применением полученных значений ПБП на первых четырех координационных сферах сплавов Fe-3,5,7ат.% Re рассчитаны энергии упорядочения и оценены температуры ФППБ. Методом псевдопотенциала рассчитаны энергии упорядочения и ПБП сплавов Fe-2.5 и 25.0 ат.%Rh.

В шестой главе исследован БП в поликристаллических сплавах Cu-Au методом ДРРЛ при учете статических смещений атомов. Диссертант экспериментально определил ПБП сплавов Cu-25, 75 ,83, 90 ат.%Au из интенсивности ДРРЛ. Проведены расчеты энергий упорядочения, рассчитаны температуры ФП сплавов с ГЦК структурой; доказана возможность оценки температур ФППБ двойного сплава на основе экспериментальных значений ПБП.

В седьмой главе представлены результаты изучения БП в сплаве Mg-10 ат.% In методом ДРРЛ с учетом статических смещений атомов. Проведены расчеты энергий упорядочения и температуры ФППБ в сплаве Mg-10 ат.% In с применением полученных параметров БП на первых десяти координационных сферах. Диссертант измерил интенсивность ДРРЛ сплавом Mg-10 ат.% In и рассчитал ПБП, с применением которых провел расчеты энергий упорядочения с оценкой температуры ФППБ.

В восьмой главе динамические матрицы и Фурье-образы компонент квазиупругих сил рассмотрены в рамках моделей Борна-Кармана и де Лане. Применены полученные выражения для динамических матриц и Фурье-образов квазиупругих сил в исследованиях БП в ГЦК сплавах Ni-13.1ат.%W, Ni-14ат.%Ir, ОЦК сплавах Fe-5 и 9 ат.%Re и ГПУ сплаве Mg10ат.%In с учетом статических смещений атомов.

В девятой главе приведены результаты расчетов энергий упорядочения и ПБП сплавов Cu-25at.%Au, Ni-14 at.%Pt, Ni-22.5at.%Fe и Ni-11 at.%Cr методом псевдопотенциала с учетом размерного эффекта. Проведены расчеты энергий упорядочения в сплавах Cu-25at.%Au, Ni-14 at.%Pt, Ni-22.5at.%Fe и Ni-11 at.%Cr.

Перейдем к общей оценке работы. Прежде всего, необходимо подчеркнуть, что **современными методами (как экспериментальными, так и теоретическими, что крайне редко встречается)** выполнено фундаментальное исследование, которое является необходимым и важным этапом в изучении ближнего порядка в поликристаллах.

В качестве основных новых научных результатов, полученных автором и имеющих существенное значение, отметим следующие.

1. В расчетах амплитуд статических смещений атомов с применением значений модулей упругости сплава, рассчитанных методом псевдопотенциала, достоверно можно определить ПБП на первых четырех-шести координационных сферах в сплавах с ГЦК структурой и на четырех сферах в сплавах с ОЦК структурой. Выявлена концентрационная зависимость ПБП на первой координационной сфере системы Ni-W; выявлена стабилизирующую роль БП в формировании структуры сплава Ni-6 ат.%W. Для сплавов Ni-14 ат.%Pt, Ni-14 ат.% Ir, Au-10,17 и 25% Cu также предсказан тип сверхструктуры.

2. Разработан метод учета вклада статических смещений атомов в интенсивности ДРРЛ поликристаллическими сплавами с использованием значений силовых постоянных межатомного взаимодействия. Впервые проведена оценка статических смещений атомов в сплавах Ni-14 ат.%Ir , Fe-9 ат.%Re, Mg-10 ат.%In.

3. Получен новый вид динамической матрицы для ОЦК, ГЦК и ГПУ структур, позволяющий проводить оценку силовых постоянных межатомного взаимодействия и модулей упругости в сплавах. Для применения динамической матрицы в расчетах амплитуд статических смещений атомов, описания экспериментальных фононных спектров, оценки в длинноволновом приближении

значений модулей упругости металлов и сплавов достаточно учесть межатомное взаимодействие на первых трех-девяти координационных сферах. Рассчитаны модули упругости ОЦК щелочных металлов Li, K, Na, Rb, Cs, ГЦК металлов Ni, Fe, Cu, Ag, Pd, ГПУ металлов Mg, Ti, Zr, Co, а также сплавов $\text{Cu}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}$, $\text{Ni}_{0.804}\text{Cr}_{0.196}$, $\text{Ni}_{0.502}\text{Fe}_{0.498}$, $\text{Ni}_{0.738}\text{Fe}_{0.262}$, $\text{Ni}_{0.892}\text{Fe}_{0.108}$, $\text{Fe}_{0.76}\text{Cr}_{0.12}\text{Ni}_{0.12}$, $\text{Fe}_{0.705}\text{Cr}_{0.175}\text{Ni}_{0.120}$ и $\text{Fe}_{0.685}\text{Cr}_{0.145}\text{Ni}_{0.145}\text{Mo}_{0.025}$, удовлетворительно совпадающие с экспериментальными данными.

4. Разработан метод уточнения фазовых диаграмм бинарных сплавов путем оценки температур ФППБ. Для определения температуры ФППБ достаточно использовать значения энергий упорядочения на первых восьми координационных сферах в сплавах с ГЦК структурой, четырех – с ОЦК структурой, восьми – с ГПУ структурой. На основе полученных соотношений с применением экспериментально определенных из ДРРЛ параметров БП определены значения температур перехода сплавов Ni-14 ат. %Pt, Ni-14 ат. %Ir, Mg-10 ат. %In и систем Fe-Re, Cu-Au, удовлетворительно совпадающие с экспериментальными данными.

5. Впервые установлено существование БП в твердых растворах системы Fe-Re и разбавленном сплаве Fe-Rh; определены ПБП на первых четырех координационных сферах и их концентрационные зависимости. Доказана тенденция сплава Fe- 7 ат. %Re к упорядочению по типу сверхструктуры B_2 .

6. Размерный эффект оказывает значительное влияние на энергию упорядочения бинарных сплавов, что подтверждается теоретическими расчетами для сплавов Cu-25 ат. %Au, Ni-14 ат. %Pt, Ni-22.5 ат. %Fe и Ni-11 ат. %Cr. Показано, что учет статических смещений при расчетах энергии упорядочения бинарных сплавов повышает сходимость теоретических и экспериментальных результатов.

Теоретическая и практическая значимость

Полученные в диссертационной работе результаты являются основой уточненных теоретических и экспериментальных методов исследования БП в сплавах с ОЦК, ГЦК и ГПУ структурами и могут применяться как при создании сплавов с особыми физико-химическими свойствами, так и для уточнения фазовых диаграмм двойных сплавов в научно-исследовательских и производственных организациях.

Практически могут быть использованы: 1. Метод определения ПБП в двойных поликристаллических сплавах из интенсивности ДРРЛ.

2. Методика учета вклада статических смещений атомов в интенсивность ДРРЛ двойными поликристаллическими сплавами.

3. Методики расчета динамики кристаллической решетки и модулей упругости металлов и сплавов через значения радиальных и тангенциальных силовых постоянных межатомного взаимодействия.

4. Методика оценки радиальных и тангенциальных силовых постоянных металлов и сплавов из экспериментальных фононных спектров.

5. Методика расчета энергий упорядочения в двойных сплавах замещения через экспериментально определенные ПБП.

6. Метод оценки температур ФППБ в двойных сплавах замещения с применением спектра энергий упорядочения, рассчитанных через экспериментально определенные ПБП.

7. Методика прогноза типа ближнего упорядочения в бинарных сплавах замещения с применением спектра энергий упорядочения, рассчитанных методом модельного потенциала с учетом статических смещений атомов.

Материалы диссертации можно использовать при чтении спецкурсов для студентов и аспирантов соответствующих специальностей.

Степень обоснованности и достоверности научных положений и выводов диссертации является достаточной и подтверждается сопоставимостью результатов, полученных различными методами, и с работами других авторов; качественной сходимостью экспериментальных и теоретических данных; непротиворечивостью используемых моделей.

Результаты работы доложены на ряде конференций, подробно опубликованы (всего 58 публикаций, из них 22 статьи в ведущих журналах, рекомендованных ВАК, индексируются базами Web of Science, Scopus и РИНЦ) и вызвали интерес специалистов. Публикаций в серьезных журналах вполне достаточно для докторской диссертации.

Соответствие диссертации специальности.

Диссертационная работа по своим целям, задачам, содержанию, методам исследования и научной новизне соответствует специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния, а именно следующим ее направлениям: 1. Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы и свойств неорганических и органических соединений в кристаллическом (моно- и поликристаллы) состоянии.

2. Теоретическое и экспериментальное исследование физических свойств упорядоченных и неупорядоченных неорганических и органических систем.

4. Теоретическое и экспериментальное исследование воздействия различных видов излучений на природу изменений физических свойств конденсированных веществ.

5. Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм.

7. Теоретические расчеты и экспериментальные измерения электронной зонной структуры, динамики решётки и кристаллической структуры твердых тел.

В качестве недостатков диссертационной работы можно указать следующие.

1. Апробация работы описана не полно. Приведены не все конференции, в которых принял участие автор. Не приведен полный список публикаций автора.

1. В диссертации используется парная модель взаимодействия атомов, хотя с середины 20-го века известно, что картина взаимодействия атомов в металлах не является парной (см. монографию М. Борна и Х. Куны). Диссертант рассчитал значения модулей упругости для ряда сплавов. Из этих расчетов следует, что соотношения Коши нарушаются во всех случаях, что говорит о многочастичном характере взаимодействия атомов в металлах. К сожалению, эта тема не нашла отражения в диссертации. Видимо, это задача для дальнейших исследований автора.

1. Недочеты оформления диссертации. Некоторые ссылки оформлены не полно: А38, 34, 78, 107, 141, 155, 236, 276. Оглавление не полностью отражает структуру диссертации: необходимо было указать все четыре приложения и благодарности, для удобства читателя приложения хорошо бы было снабдить заголовками.

Несмотря на сделанные замечания, работа, в целом, оставляет приятное впечатление, замечания не умаляют значимости диссертационного исследования, основная часть диссертации написана хорошим языком. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода.

Диссертационную работу Лхамсурэн Энхтора можно квалифицировать как законченное оригинальное исследование, выполненное на высоком научном уровне и развивающее новое направление в физике поликристаллов. Содержание автореферата соответствует содержанию диссертации. Публикации полно отражают основные научные положения и выводы, содержащиеся в диссертации. Диссертация является надежной базой для дальнейших исследований ближнего порядка в сплавах, в том числе для исследования многочастичных эффектов.

Рассматриваемая работа по уровню, по поставленным задачам, по объему, по публикациям и по важности полученных результатов удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, оформлена согласно требованиям Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук МГУ имени М.В.Ломоносова.

Содержание диссертации соответствует специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния (по физико-математическим наукам).

Результаты диссертации можно рекомендовать использовать при исследовании ближнего порядка в поликристаллах, в том числе в следующих организациях: Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН, Красноярск, Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Институт физики металлов им. М.Н. Михеева УрО РАН, Екатеринбург, Институт физики им. Х.И. Амирханова ДФИЦ РАН, Махачкала, Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Монгольский государственный университет, Улан-Батор.

На основании изложенного считаю, что соискатель Лхамсурэн Энхтор заслуживает присвоения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Доцент кафедры программного обеспечения вычислительной техники и автоматизированных систем Инженерно-технологического института Хакасского государственного университета им. Н.Ф. Катанова, доктор физ.-мат. наук по специальности 01.04.07 Физика конденсированного состояния, профессор [redacted] Удодов Владимир Николаевич
27.03.2025

Адрес: 655017, Россия, республика Хакасия, г. Абакан, пр. Ленина, д. 92/1, оф. 513.

Телефон: [redacted]

E-mail: udodov@khsu.ru

[redacted] профессора Удодова В.Н. удостоверяю
научке и инновациям ХГУ им. Н.Ф. Катанова:

[redacted] Попов Андрей Анатольевич

[redacted] оформляется в 2 экземплярах.