

ОТЗЫВ

официального оппонента о диссертационной работе Лхамсурэна Энхтора «Ближний порядок и статические смещения в бинарных поликристаллических твердых растворах замещения с различными кристаллическими структурами», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Лхамсурэна Энхтора посвящена изучению ближнего упорядочения в бинарных металлических твердых растворах с учетом атомного размерного эффекта методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей.

Ближний порядок в расположении атомов металлических твердых растворов определяет физические параметры, например, прочность, электросопротивление и т.д., таких систем. При этом, несмотря на длительную историю изучения ближнего порядка в металлических твердых растворах, проблема учета влияния статических смещений атомов на формирование ближнего порядка окончательно не разрешена. Таким образом, представленное диссертационное исследование, направленное на развитие экспериментальных и теоретических методов определения параметров ближнего порядка в поликристаллических сплавах с ОЦК, ГЦК и ГПУ структурами с учетом вклада статических смещений атомов, обусловленных размерным эффектом, является необходимым и своевременным как с фундаментальной научной, так и с практической точки зрения.

Диссертационная работа изложена на 263 страницах и состоит из введения, девяти глав, заключения, списка цитированной литературы из 281 наименования и четырех приложений.

Во введении обоснована актуальность тематики исследования, сформулирована цель и поставлены задачи диссертационной работы, показана ее научная новизна и практическая значимость, изложены основные

положения, выносимые на защиту.

В первой главе представлен обзор литературных данных по статистической теории ближнего порядка в бинарных сплавах, применению диффузного рассеяния рентгеновских лучей для изучения ближнего порядка и методикам расчета энергий упорядочения.

Во второй главе проводится анализ существующих методов определения статических смещений атомов в бинарных сплавах замещения, основанных на использовании диффузного рассеяния рентгеновских лучей. Доказывается, что преимуществом обладает метод флуктуационных волн Кривоглаза. В заключение главы формулируются задачи, решение которых позволит использовать метод флуктуационных волн для определения параметров ближнего порядка.

В третьей главе автором найдены общие выражения для динамических матриц металлов и сплавов с ОЦК и ГЦК структурами и произвольным числом координационных сфер, а также динамических матриц металлов и сплавов с ГПУ структурой и восемью первыми координационными сферами. На основе полученных выражений были вычислены модули упругости для чистых металлов Li, Na, K, Rb, Cs, Ni, Pd, Ag, α -Fe, γ -Fe, Y, Mg, Ti, Zr, Co и сплавов $\text{Cu}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}$, $\text{Ni}_{0.804}\text{Cr}_{0.196}$, $\text{Ni}_{0.502}\text{Fe}_{0.498}$, $\text{Ni}_{0.738}\text{Fe}_{0.262}$, $\text{Ni}_{0.892}\text{Fe}_{0.108}$, $\text{Fe}_{0.76}\text{Cr}_{0.12}\text{Ni}_{0.12}$, $\text{Fe}_{0.705}\text{Cr}_{0.175}\text{Ni}_{0.120}$, $\text{Fe}_{0.685}\text{Cr}_{0.145}\text{Ni}_{0.145}\text{Mo}_{0.025}$. Показано соответствие расчетных и экспериментальных результатов.

В четвертой главе развита методика определения параметров ближнего порядка на первых четырех-шести координационных сферах в ГЦК-сплавах и на четырех сферах в ОЦК-сплавах. Методика основана на учете статических смещений атомов при интерпретации данных диффузного рассеяния рентгеновских лучей в рамках кинематического приближения. Методика апробирована при исследовании бинарных сплавов на основе никеля Ni-1.6, 6, 13.1 ат.% W, Ni-14 ат.% Ir, Ni-14 ат.% Pt. Для сплавов Ni-1.6, 6, 13.1 ат.% W определены параметры ближнего порядка для первых четырех сфер, а для сплавов Ni-14 ат.% Ir, Ni-14 ат.% Pt – параметры ближнего порядка для первых

шести сфер. Доказано существование ближнего порядка типа $L1_2$ в сплавах Ni-14 ат.% Ir, Ni-14 ат.% Pt.

В пятой главе впервые экспериментально установлено существование ближнего порядка в сплавах Fe-3, 5, 7 ат.% Re и Fe-2.5, 25.0 ат.% Rh, определены параметры ближнего порядка на первых четырех координационных сферах и их концентрационные зависимости.

В шестой главе развитая ранее методика определения параметров ближнего порядка из картины интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей применяется для определения параметров ближнего порядка в сплавах Au-10, 17, 25 ат.% Cu и Cu-25 ат.% Au. В поликристаллических сплавах Cu-Au определены параметры ближнего порядка на первых девяти координационных сферах и выявлена концентрационная зависимость значений параметров ближнего порядка на первых трех координационных сферах. Помимо этого, разработана методика оценки критических температур фазового перехода порядок-беспорядок бинарных сплавов на основе значений параметров ближнего порядка этих сплавов, определенных из экспериментальных данных. Такая методика позволяет уточнить фазовые диаграммы равновесия бинарных сплавов.

В седьмой главе разработана методика определения параметров ближнего порядка для координационных сфер близких радиусов в ГПУ-сплавах на основе интенсивности картины диффузного рассеяния рентгеновских лучей. Для ГПУ-сплава Mg-10 ат.% In определены параметры ближнего порядка для первых десяти координационных сфер, доказано формирование ближнего порядка по типу Mg_3Cd , определена температура Дебая и критическая температура фазового перехода порядок-беспорядок.

В восьмой главе разработана методика расчета амплитуд волн статических смещений атомов с применением значений силовых постоянных межатомного взаимодействия. Это позволило определять параметры ближнего порядка и статические смещения атомов из положений “средней решетки” на первых семи координационных сферах для ГЦК-сплавов и девяти

сферах для ОЦК-сплавов. При помощи разработанной методики были определены статические смещения атомов на первых семи координационных сферах в сплаве Ni-14 ат.% Ir, на первых четырех координационных сферах в сплаве Fe-9 ат.% Re, на первых шести координационных сферах в сплаве Mg-10 ат.% In, выявлена концентрационная зависимость параметра ближнего порядка на первой сфере в сплавах Fe-3,5,7,9 ат.% Re.

В девятой главе разработана методика, позволяющая учитывать статические смещения атомов при вычислении энергии упорядочения бинарных сплавов методом псевдопотенциала. Методика апробирована при вычислении энергии упорядочения в сплавах Cu-25 ат.% Au, Ni-14 ат.% Pt, Ni-22.5 ат.% Fe и Ni-11 ат.% Cr, где показано определяющее влияние размерного эффекта на энергию упорядочения бинарных сплавов.

В заключении представлены основные результаты и выводы диссертационного исследования.

В приложениях приведены объемные математические выводы и расчетные методики.

Диссертационная работа Лхамсурэна Энхтора представляет собой цельное законченное научное исследование, выполненное и изложенное на высоком профессиональном научно-техническом уровне. Научные положения, выносимые на защиту, и выводы работы обоснованы, их достоверность и новизна не вызывает сомнений.

Вместе с тем к диссертационному исследованию имеются некоторые вопросы и замечания:

1. При вычислениях энергии упорядочения используется метод псевдопотенциала с применением модельных потенциалов Анималу и Хейне-Абаренкова-Анималу. В последние годы при вычислениях энергии упорядочения все чаще используются первопринципные квантово-механические методы. Чем объясняется использование в работе именно метода псевдопотенциала?

2. Для определения параметров ближнего порядка используются картины интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей, полученные на лабораторном источнике рентгеновского излучения. Будет ли использование синхротронного излучения перспективным для определения параметров ближнего порядка?

Результаты диссертационного исследования в полной мере отражены в 22 статьях, опубликованных в рецензируемых научных журналах, входящих в основные базы данных RSCI, Web of Science, Scopus. Результаты диссертационного исследования были апробированы на 28 международных и российских конференциях. Автореферат и опубликованные работы полностью отражают содержание диссертационной работы.

Диссертационная работа Лхамсурэна Энхтора на соискание ученой степени доктора наук в полной мере удовлетворяет требованиям Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова. Содержание диссертации соответствует специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным п.п. 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 кандидата наук, 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 физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой физики

твёрдого тела физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»

Орешко Алексей Павлович

27.03.2024

Контактные данные

тел.: +7(495)939-23-87; e-mail: oreshkoap@my.msu.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом защищена диссертация:
01.04.07 – физика конденсированного состояния

Адрес места работы: 19991, г. Москва, Ленинские горы д. 1, стр. 2, Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, физический факультет, кафедра физики твёрдого тела, тел.: +7(495)939-23-87; e-mail: oreshkoap@my.msu.ru

Подпись заведующего кафедрой физики твёрдого тела физического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова Орешко А.П. удостоверяю:

и.о. декана физического факультета

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»

д.ф.-м.н. профессор

В.В. Белокуров