

**ОТЗЫВ на автореферат 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**

Автореферат Энхтора Л. посвящена развитию методов исследования ближнего порядка в двойных твердых растворах замещения методом диффузного рассеяния рентгеновских лучей (ДРРЛ), а также расчетам параметров ближнего порядка методом псевдопотенциала. Для достоверного определения параметров ближнего порядка в исследуемых твердых растворах автор применил метод флуктуационных волн для учета и оценки статических смещений атомов, обусловленных размерным эффектом. Экспериментальные значения параметров ближнего порядка исследуемых твердых растворов применялись в расчетах энергий упорядочения с применением уравнений статистической теории упорядочения, с последующей оценкой критических температур фазового перехода порядок-беспорядок. Теория псевдопотенциала применена в расчетах энергии парного взаимодействия, силовых постоянных и модулей упругости твердых растворов, а также в расчетах энергий упорядочения с учетом статических смещений атомов.

Актуальность работы определяется необходимостью развития методов исследования ближнего упорядочения экспериментальными и теоретическими методами. В ранних исследованиях ближнего порядка в поликристаллических образцах методом ДРРЛ статические смещения атомов, обусловленные

размерным эффектом, учитывались частично или в длинноволновом приближении, что обуславливало значительные погрешности в определении параметров ближнего порядка. Поэтому с применением экспериментальных значений параметров ближнего порядка не всегда удавалось рассчитать энергии упорядочения и оценить критическую температур фазового перехода порядок-беспорядок, что имеет значение в уточнении фазовых диаграмм равновесия. В настоящее время для двух-третей двойных твердых растворов, исследованных экспериментально на предмет существования параметров ближнего порядка, не удастся правильно прогнозировать расчетами методом модельного потенциала наличие ближнего порядка в расположении атомов компонент.

Новизна Автор получил новые выражения для динамических матриц для объемно-центрированной кубической (ОЦК), гранецентрированная кубическая (ГЦК) и гексагональной плотноупакованной (ГПУ) структур в рамках модели Де Лане, с применением которых имеются возможности достоверной оценки радиальных и тангенциальных силовых постоянных из экспериментальных значений фононных частот. Обработкой фононных спектров Cs, α -Fe, γ -Fe, Ni с различными кристаллическими структурами показано, что с применением полученных выражений динамических матриц модель Де Лане имеет преимущества по сравнению с моделью Борна-Кармана в аспекте извлечения силовых постоянных межатомного взаимодействия из фононных спектров. В длинноволновом приближении из выражений динамических матриц получены формулы расчетов модулей упругости для металлов, сплавов с ОЦК, ГЦК и ГПУ структурами, выраженные через радиальные и тангенциальные силовые постоянные, что позволяет рассчитать модули упругости методом псевдопотенциала. Полученные выражения динамических матриц применялись в расчетах амплитуд волн статических

смещений из системы уравнений, связывающих Фурье-образы квазиупругих сил и динамическую матрицу. Рассчитанные таким образом амплитуды статических смещений применялись в построении модулирующих функций ближнего порядка, посредством которых методом наименьших квадратов из экспериментальной интенсивности диффузного рассеяния рентгеновских лучей определялись параметры ближнего порядка. Достоверность полученных результатов проверялись расчетами через них из уравнений статистической теории упорядочения энергий упорядочения, которые применялись в расчетах критических температур фазового перехода порядок-беспорядок при сопоставлении с фазовыми диаграммами равновесия. Проведен факторный анализ в методе определения параметров ближнего порядка из интенсивности рассеяния рентгеновских лучей путем построения модулирующих функций ближнего порядка. Развита методика определения параметров ближнего порядка на дальних координационных сферах ГПУ сплавов из интенсивности ДРРЛ с различием на сферах с практически одинаковыми радиусами.

Личный вклад соискателя. В обработках экспериментальных результатов автор применил ряд математических методов расчета: метод наименьших квадратов, факторный анализ, метод оптимизации, вычисление собственных значений динамической матрицы, интегрирование и усреднение по первой зоне Бриллюэна, приведение волнового вектора в первую зону Бриллюэна, решение систем самосогласованных уравнений Каули. Эти методы и теоретические расчеты методом псевдопотенциала реализованы автором на программном языке Фортран.

Результаты работы достаточно опубликованы, автор правильно отразил в автореферате главные свои работы в наиболее авторитетных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus и РИНЦ.

Содержание автореферата 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.

Соискатель Лхамсурэн Энхтор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния.

доктор физико-математических наук,
заместитель директора по научной работе Лаборатории информационных технологий им. М.Г. Мещерякова Объединенного института ядерных исследований,

Очбадрах ЧУЛУУНБААТАР

28.03.2025

Контактные данные:

тел.: ; e-mail: chuka@jinr.ru

Специальность, по которой защищена диссертация:

05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, физико-математические науки

Адрес места работы:

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

Лаборатория информационных технологий им. М.Г. Мещерякова
Объединенного института ядерных исследований

Тел.: +7 (496) 21 65059; e-mail: post@jinr.ru

Я, Очбадрах Чулуунбаатар, даю свое согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета МГУ.013.6 и их дальнейшую обработку «28» марта 2025 г.

Подпись сотрудника

Лаборатории информационных технологий им. М.Г. Мещерякова
Объединенного института ядерных исследований О. Чулуунбаатара

удостоверяю:

ученый секретарь ЛИТ ОИЯИ

к.ф.-м.н. Дереновская О.Ю

28.03.2025