

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Гончаровой Евгении Васильевны «Межузельные дефекты в простых металлических кристаллах и их идентификация в твердом некристаллическом состоянии», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - «Физика конденсированного состояния».

Актуальность темы диссертации

Как известно, определение концентрации точечных дефектов (вакансий и межузельных атомов) в металлах является одной из важных задач физики твердого тела, поскольку их наличие оказывает влияние на многие физические свойства материалов.

В настоящее время в литературе преобладает мнение о том, что равновесная концентрация межузельных атомов при любой температуре пренебрежимо мала по сравнению с концентрацией вакансий. Это мнение противоречит межузельной теории конденсированного состояния, являющейся одним из перспективных подходов для описания релаксационных явлений в равновесных и переохлажденных расплавах, а также металлических стеклах. Согласно межузельной теории, концентрация межузельных дефектов вблизи температуры плавления в кристаллическом состоянии может быть сопоставима с концентрацией вакансий и, более того, генерация межузельных атомов в предплавленной области может быть причиной дестабилизации кристаллической решетки и плавления вещества. В связи с этим возникает объективная необходимость проверки исходных гипотез этой теории: действительно ли плавление кристаллов связано с генерацией межузельных дефектов и адекватно ли утверждение о том, что после плавления кристалла и последующей закалки расплава межузельные дефекты остаются идентифицируемыми структурными объектами в твердом некристаллическом состоянии. Решению этих важных вопросов посвящена диссертация Е.В. Гончаровой. В силу этого, **актуальность** проведенных исследований, направленных на апробацию основных идей межузельной теории, не вызывает сомнений.

Содержание диссертационной работы

Автором проделана большая экспериментальная и теоретическая работа. Проведенные прецизионные измерения модуля сдвига простых металлических кристаллов позволили получить информацию о предплавильной генерации межузельных дефектов. Определение температурной зависимости концентрации межузельных дефектов в алюминии, расчет сдвиговой восприимчивости, идентификация в стеклообразном состоянии «дефектов», подобных межузельным гантелям в кристалле, были выполнены методом компьютерного моделирования.

Оппонируемая диссертация состоит из введения (сформулированы актуальность темы исследования, цели и задачи, научная новизна и практическая значимость работы, положения, выносимые на защиту), пяти глав, общих выводов по работе и списка литературы, включающего 169 библиографических наименований отечественных и зарубежных источников. Работа изложена на 131 странице, включая 41 рисунок и 3 таблицы.

В первой главе приведен литературный обзор основных положений межузельной теории. Автор уделяет большое внимание применимости межузельной теории к описанию релаксационных свойств в металлических стеклах.

Во второй главе описаны методика измерения модуля сдвига и компьютерного моделирования. Дана информация об исследованных металлических кристаллах, а также приведены первичные данные об их структуре. Обращает внимание комплексный подход к исследованию и использование современных методик и приборов.

В третьей главе содержатся результаты исследования предплавильной генерации межузельных дефектов в простых металлических кристаллах – алюминии и индии. Излагаются результаты исследования взаимосвязи между предплавильным нелинейным ростом теплоемкости алюминия и интенсивной генерацией межузельных дефектов.

В четвертой главе на основе компьютерного моделирования реализован метод идентификации в стеклообразном алюминии «дефектов», подобных

межузельным гантелям в кристалле.

В пятой главе представлены результаты интерпретации изменений плотности, возникающих при структурной релаксации и кристаллизации металлических стекол.

Научная новизна и достоверность результатов

В качестве наиболее важных новых научных результатов работы следует отметить следующие:

1. Посредством прецизионных измерений модуля сдвига обнаружен значительный диаэластический эффект в предплавильных областях алюминия и индия. Анализ этого эффекта показал, что он обусловлен тепловой генерацией междузельных дефектов в наиболее устойчивой гантельной форме. Рассчитана концентрация междузельных дефектов, оказавшаяся сопоставимой (алюминий) или даже превышающей (индий) концентрацию вакансий непосредственно перед температурой плавления.

2. Молекулярно-динамическое моделирование подтвердило результаты анализа эксперимента.

3. На основе полученных результатов определен вклад междузельных дефектов в теплоемкость алюминия. Показано, что этот вклад дает нелинейный рост теплоемкости вблизи температуры плавления, наблюдаемый не только в алюминии, но и в ряде других металлов. Природа этого нелинейного роста при этом считалась в литературе невыясненной.

4. С помощью компьютерного моделирования разработан метод идентификации структурных «дефектов» в стеклообразном алюминии. Обнаружено, что эти «дефекты» проявляют свойства, характерные для междузельных гантелей в кристаллическом состоянии.

5. Показано, что на основе междузельной теории можно объяснить изменения плотности, возникающие при структурной релаксации и кристаллизации металлических стекол.

Достоверность и обоснованность основных положений и выводов, представленных в диссертационной работе, обеспечивается использованием преци-

зионного современного оборудования, воспроизводимостью результатов исследований, соответствием полученных результатов литературным данным и базовым представлениям физики конденсированного состояния. Следует отметить исключительно высокое качество проведенных измерений модуля сдвига.

Практическая значимость

Полученные результаты подтверждают основные положения межузельной теории, которая может послужить основой для адекватного понимания релаксационных явлений в металлических некристаллических веществах. Непосредственная практическая значимость работы заключается в разработке с помощью компьютерного моделирования методики идентификации в стеклообразном состоянии структурных «дефектов», подобных межузельным гантелям в кристалле.

Замечания по диссертации

1. Из текста диссертации неясен физический смысл параметра α в основных уравнениях межузельной теории (1.5) и (1.6).

2. Было бы полезно привести данные о зеренной структуре образцов поликристаллического индия до термообработки (в исходном состоянии).

3. В параграфе 4.2 (Структурные дефекты в твердом некристаллическом состоянии) представлены результаты расчетов тензоров локальной диаэластической податливости для трех дефектов в компьютерной модели стеклообразного алюминия. Было бы важно пояснить, чем обусловлен выбор именно этих дефектных атомов из всех идентифицированных.

Вышеупомянутые замечания не снижают общей положительной оценки диссертационной работы Гончаровой Е.В.

Заключение

В целом можно констатировать, что диссертация Евгении Васильевны Гончаровой является законченной научно-квалификационной работой, являющейся актуальной, а ее результаты – новыми. В работе представлен большой экспериментальный и теоретический материал по исследованию предплавиль-

ной генерации межузельных дефектов в простых металлических кристаллах и их идентификации в твердом некристаллическом состоянии.

Диссертация Гончаровой Е.В. изложена в доступной форме и снабжена большим количеством иллюстраций. Автореферат полно отражает содержание диссертации, основные результаты которой полностью опубликованы в 5 статьях в научных журналах, входящих в перечень ВАК РФ и индексируемых международными базами данных Web of Science и Scopus. Результаты, представленные в диссертации, неоднократно докладывались на международных научных конференциях.

Считаю, что в диссертации Гончаровой Е.В. «Межузельные дефекты в простых металлических кристаллах и их идентификация в твердом некристаллическом состоянии» решена важная научная задача. Она соответствует требованиям п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. №842, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Автор диссертации, Гончарова Евгения Васильевна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния».

Официальный оппонент,
главный научный сотрудник
кафедры физического материаловедения
ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский
технологический университет «МИСиС»,
д.ф.-м.н. по специальности 01.04.07
«Физика конденсированного состояния»,
профессор

ГЛЕЗЕР
Александр Маркович

7.11.2018

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС». Почтовый адрес: 119049, г. Москва, Ленинский просп., 4. Тел.: 8(916)122-19-74. E-mail: a.glezer@mail.ru.

«Подпись А.М. Глезера заверяю»

Проректор НИТУ «МИСиС»



М.Р. Филонов