

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».

Диссертация Е.В. Гончаровой посвящена поиску экспериментальных подтверждений генерации межузельных дефектов в простых металлических кристаллах в предплавильной области температур и идентификации подобных «дефектов» в твердом некристаллическом состоянии методом компьютерного моделирования. **Актуальность** этих проблем не вызывает сомнений. Во-первых, из имеющейся на сегодняшний день литературы известно, что равновесные межузельные атомы в кристаллах в скольких-нибудь значительных количествах не образуются. Однако, известны экспериментальные факты, которые этому мнению противоречат. С другой стороны, хорошо зарекомендовавшая себя межузельная теория конденсированного состояния утверждает, что межузельные атомы возникают в кристаллах в относительно больших концентрациях в предплавильной области температур и, более того, являются причиной дестабилизации кристаллической решетки и плавления вещества. При этом эти дефекты наследуются расплавом, а закалка расплава, в свою очередь, фиксирует их в твердом некристаллическом состоянии. В таком случае релаксационные явления в стекле можно интерпретировать в терминах изменения концентрации таких «дефектов», замороженных при закалке расплава. Эта качественная схема позволяет интерпретировать целый ряд релаксационных явлений в равновесных и переохлажденных расплавах, а также в металлических стеклах. Анализ степени адекватности этого подхода является несомненно важным для

развития теории конденсированного состояния. Подробное исследование данного вопроса и составляет основное содержание диссертации Е.В. Гончаровой.

Обоснование генерации межузельных дефектов в диссертационной работе проведено на основе прецизионных измерений модуля сдвига методом электромагнитного акустического преобразования. Идентификация дефектов типа межузельных гантелей в твердом некристаллическом состоянии выполнена методом молекулярной динамики. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения с выводами и списка цитируемой литературы. Содержание работы изложено на 131 странице машинописного текста, включая 41 рисунок, 3 таблицы и список литературы из 169 литературных источников.

В работе представлены интересные и принципиально новые **результаты**, в числе которых можно выделить:

1. Установлено наличие значительного диаэластического эффекта в предплавильной области температур кристаллов алюминия и индия. Анализ этого эффекта позволил сделать вывод о том, что его причиной является генерация межузельных дефектов в их наиболее устойчивой гантельной форме. Этот вывод подтвержден результатами проведенного моделирования монокристаллического алюминия методом молекулярной динамики. Рассчитана концентрация межузельных дефектов в предплавильной области температур.

2. На основе полученных данных о температурной зависимости концентрации межузельных дефектов показано, что известный в литературе предплавильный нелинейный рост теплоемкости алюминия (и других металлов) может быть интерпретирован как результат интенсивной предплавильной генерации межузельных дефектов. Природа этого явления считалась ранее неизвестной.

3. Предложен метод идентификации «дефектов», подобных межузельным гантелям в кристалле, в компьютерной модели некристаллического алюминия. Показано, что некристаллический алюминий, полученный закалкой расплава, содержит значительное количество «дефектов» со свойствами, характерными для межузельных гантелей в кристалле.

4. Установлено, что изменения плотности, происходящие как при структурной релаксации, так и при кристаллизации металлических стекол, могут быть интерпретированы как результат изменения концентрации дефектов типа межузельных гантелей, замороженных при закалке расплава, в соответствии с идеологией межузельной теории.

Стоит также обратить отдельное внимание на тщательность выполнения экспериментов по измерению модуля сдвига, а также детальность в проведении молекулярно-динамического моделирования. Результаты диссертации многократно опубликованы в журналах, индексируемых базами Web of Science и Scopus.

Новизна и достоверность полученных результатов, а также их **научная значимость**, сомнений не вызывают. Выводы диссертации и основные положения, выносимые на защиту, представляются полностью **научно обоснованными**.

К диссертационной работе можно сделать следующие **замечания**:

1. Абсолютное значение модуля сдвига монокристалла алюминия рассчитывалось с учетом теплового расширения. Однако при расчете модуля сдвига поликристалла индия оно не было принято во внимание.

2. При анализе различных вкладов в теплоемкость алюминия ничего не сказано об определении квазигармонического вклада так называемой дебаевской теплоемкости.

3. В диссертации указано, что внутреннее трение было рассчитано как полуширина резонансной кривой, но, к сожалению, никаких данных о внутреннем трении кристаллов алюминия и индия не представлено.

4. На стр. 107 на рис. 5.1 представлена линейная зависимость изменения плотности материала на основе Pd при структурной релаксации. По представленному графику видно, что величина ошибки, с которой определены данные по оси ординат, достаточно велика. Несмотря на то, что такая погрешность, как пишет диссертант, соответствует погрешности исходных измерений, проведенная линейная аппроксимация не является однозначной и представляется весьма условной. То же самое замечание относится и к определению наклона кривой относительного изменения плотности при кристаллизации металлических стекол на основе Zr (рис. 5.2 стр. 109.).

Вышеперечисленные замечания, однако, не снижают научной значимости диссертационной работы. Диссертация Е.В. Гончаровой является законченным научным исследованием и соответствует паспорту специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния». Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Считаю в целом, что диссертация «Межузельные дефекты в простых металлических кристаллах и их идентификация в твердом некристаллическом состоянии» отвечает всем требованиям п. 9 - 14 действующего «Положения о присуждения ученых степеней» ВАК Минобрнауки РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор несомненно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 «Физика конденсированного состояния».

Официальный оппонент,
старший научный сотрудник
лаборатории структурных
исследований ФГБУН «Институт
физики твердого тела РАН»,
к.ф.-м.н. по специальности
01.04.07 «Физика
конденсированного состояния»,
доцент

МАТВЕЕВ
Данила Викторович

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт
физики твердого тела Российской академии наук».

Почтовый адрес: 142432, Московская область, г. Черноголовка,
ул. Академика Осипьяна, 2.

Тел.: 8 (496) 522-84-47.

E-mail: matveev@issp.ac.ru.

Подпись Матвеева Д.В. заверяю

09.11.2018



Абросимова Г.Е.
Ученый секретарь ИФТТ РАН