

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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».

Диссертационная работа Е.В. Гончаровой посвящена оценке базисных идей межузельной теории – определению возможности генерации равновесных межузельных дефектов в предплавильной области простых металлических кристаллов, анализу возможности существования в твердом некристаллическом состоянии структурных объектов, подобных межузельным дефектам в кристалле на примере монокристаллического/стеклообразного алюминия и поликристаллического индия. Работа, безусловно, является актуальной, поскольку служит подтверждением базисных идей межузельной теории, удивительно точно описывающей не только плавление простых металлических кристаллов, но и многочисленные релаксационные явления в металлических стеклах, теплоемкость равновесных и переохлажденных жидкостей и пр.

К наиболее важным и оригинальным результатам данной работы следует отнести:

1. Установлено, что концентрация межузельных дефектов в области предплавильных температур составляет $10^{-4} - 10^{-3}$, быстро возрастающая по мере приближения к температуре плавления.

2. Рассчитан вклад в теплоемкость, обусловленный межузельными дефектами в алюминии. Показано, что наблюдаемый резкий рост теплоемкости в предплавильной области температур может быть обусловлен тепловой генерацией межузельных атомов.

3. На основе компьютерной модели твердого некристаллического алюминия, полученного закалкой расплава, разработан метод идентификации «дефектов», подобных межузельным гантелям в кристаллическом состоянии. Объяснены изменения плотности, происходящие при структурной релаксации и кристаллизации металлических стекол. Показано, что эти изменения могут быть интерпретированы как результат изменения концентрации межузельных дефектов, замороженных при закалке расплава.

К замечаниям по автореферату можно отнести:

1. В параграфе 4.3 не указано число атомов модулируемой системы стеклообразного алюминия, а также являются ли четыре атома (для которых приведены колебательные спектры на Рисунке 9) единственными дефектами в данной системе. Без этой информации непонятно определение процентного числа дефектов системы в выводе 5.

