

ОТЗЫВ

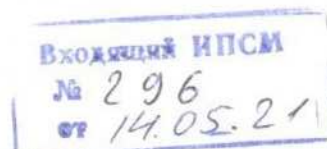
официального оппонента на диссертационную работу

Шарапова Евгения Анатольевича «Кристаллография и энергетика сверхструктурных планарных дефектов тройных упорядочивающихся сплавов на примере сплавов Гейслера», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

В диссертационной работе Шарапова Е.А. проведено системное исследование планарных сверхструктурных дефектов в сплаве стехиометрии A_2BC с использованием модели парных связей и жестких координационных сфер.

Актуальность темы исследования обусловлена тем, что в настоящее время интерес научного общества привлекают материалы с многофункциональными свойствами. Данная характеристика может быть отнесена к металлам и сплавам, в которых изменение ряда внешних условий, таких как давление, температура, электромагнитное поле, влечет за собой контролируемое изменение одного или нескольких физических свойств. К такому классу материалов относят пьезоэлектрики, магнитокалорические материалы, магнестрикционные материалы, сплавы с эффектом памяти формы и некоторые другие. Интерес к функциональным материалам обусловлен интенсивным развитием современных технологий, для которых требуется, в частности, расширение диапазона внешних условий, предполагающих стабильную работу устройств.

В свою очередь, физические и механические свойства материала зависят от его внутренней структуры, где, в упорядоченных сплавах, особое место занимают планарные сверхструктурные дефекты, которые, в частности, могут оказывать значительное влияние на магнитные свойства материалов, затрудняя перемещения доменных стенок в процессе перемагничивания. В работе Шарапова Е.А. впервые проведен кристаллогеометрический анализ тройных сплавов Гейслера стехиометрического состава A_2BC со сверхструктурой $L2_1$ и описаны все возможные в ней виды планарных сверхструктурных дефектов. Данное направление исследований является актуальным, в частности, в ключе активного исследования фазовых переходов, при которых проявляется связь между кристаллической решеткой и магнитной спиновой подсистемой, что приводит к одновременному изменению структуры и магнитных свойств под действием внешних параметров, где присутствие сверхструктурных планарных дефектов может оказывать значительное влияние на динамику перемагничивания.



Структура диссертации. Диссертационная работа Шарапова Е.А. состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и двух приложений. Работа изложена на 114 страницах, список литературы состоит из 106 источников.

В первой главе диссертации автором представлен обзор существующей литературы и введение в проблематику описания структуры упорядоченных сплавов на примере сплавов Гейслера, а также структурных и энергетических характеристик дефектов. Перечислены известные подходы к классификации сверхструктурных дефектов, раскрыто явление сверхструктурного упрочнения, приведены примеры исследования упорядочения с использованием метода Монте Карло. Глава заканчивается выводами с кратким изложением существующих достижений и пробелов в области кристаллогеометрии тройных сплавов, из которых логически следует формулировка цели и задач диссертационной работы.

Во второй главе приведен анализ кристаллогеометрии бездефектной сверхструктуры $L2_1$, описано заполнение координационных сфер вокруг атомов всех трех сортов, рассчитана энергия сублимации сверхструктуры $L2_1$ в модели парных взаимодействий. Аналитический расчет энергии сублимации сверхструктуры, состоящей из четырех моноатомных упаковок, в расчете на единицу объема, производился путем суммирования энергии удаления моноатомных упаковок друг от друга с энергиями этих упаковок. Полученное выражение позволило оценить вклад отдельных связей в энергию сублимации на отдельных координационных сферах. В заключительном разделе показаны все геометрически различные, но энергетически эквивалентные представления сверхструктуры $L2_1$. В завершении, приведены выводы по главе.

Третья глава диссертации Шарапова Е.А. посвящена анализу сверхструктурных планарных дефектов в рассматриваемом сплаве со стехиометрией A_2BC и сверхструктурой $L2_1$. Приведено определение антифазной границы, классификация этих границ, определены вектора антифазности, при сдвиге на которые могут формироваться подобные дефекты. В разделе 3.2 автором сделан вывод, что в сверхструктуре $L2_1$ возможно только два типа свехструктурных дефектов – термические и сдвиговые антифазные границы. В главе также перечислены возможные плоскости залегания этих границ с индексами Миллера не больше 2.

Четвертая глава работы посвящена анализу процесса упорядочения модельного трехкомпонентного сплава с использованием метода Монте Карло, с учетом температуры. Для этого автором были получены аналитические выражения для параметров ближнего порядка, исходя из выбранных концентраций элементов, что позволяет моделировать упорядочение в тройных сплавах в широком интервале параметров. Использование

вакансионного механизма диффузии позволяет моделировать процесс упорядочения при различных температурах, изменяя вероятность перескока вакансии. В заключительном разделе главы перечислены разновидности процессов, при моделировании которых может быть полезна разработанная автором модель.

В заключении сформулированы основные выводы по работе.

Научная новизна и достоверность защищаемых положений. Достоверность полученных данных подтверждается использованием строгого математического аппарата, а также публикацией полученных результатов в профильных журналах, подразумевающих рецензирование экспертами по теме работы.

Научная новизна работы обусловлена следующим:

- В данной работе **впервые** проведен кристаллогеометрический анализ тройных сплавов со стехиометрией $L2_1$.
- **Впервые** системно описаны все возможные сверхструктурные дефекты и описаны их энергетические характеристики.
- **Впервые** получены выражения для энергии упорядочения тройных сплавов.

Практическая и теоретическая значимость. Полученные в диссертации результаты представляют интерес для специалистов, работающих в области тройных упорядоченных сплавов и могут быть использованы для анализа влияния различных видов деформации на формирование сверхструктурных дефектов с учетом активных плоскостей скольжения, а также их влияние на свойства упорядоченных сплавов.

К важнейшим результатам работы Шарапова Евгения Анатольевича можно отнести следующие:

- Проведен анализ заполнения координационных сфер, позволяющий на качественном уровне, судить о вкладах различных парных связей в энергию сублимации сплава стехиометрии A_2BC .
- Показано, что в упорядоченных сплавах со сверхструктурой $L2_1$ возможно формирование только сдвиговых и термических сверхструктурных дефектов, а доменных границ типа инверсионных или поворотных не существует.
- Определены все возможные плоскости залегания сдвиговых антифазных границ в упорядоченном сплаве со стехиометрией сплава Гейслера.

После прочтения диссертации и автореферата возникли следующие **вопросы и замечания:**

1. В работе использовано приближение твердых сфер и парных взаимодействий, что безусловно носит универсальный характер. Однако в реальных упорядоченных сплавах характер взаимодействия компонентов может значительно отличаться и вносить

качественные различия в зависимости энергии границ от их типа и ориентации. С учетом этого целесообразным представлялось бы проведение расчетов для нескольких примеров конкретных материалов с целью выявления отклонения от полученных теоретических результатов.

2. Автором получен вывод о том, что есть ряд плоскостей, в которых сдвиговые антифазные границы могут быть реализованы с наибольшей долей вероятности: плоскости (011) (110) (01-1) и (1-10). Насколько значимыми могут быть данные результаты в макромасштабе с учетом поликристаллического характера большинства материалов?

3. В главе 4 при проведении моделирования процесса упорядочения методом Монте Карло в расчетную ячейку размером 10000 атомов внедрена одна вакансия, что соответствует концентрации 10^{-4} . Такая концентрация характерна для предплавильных температур и, очевидно, значительно повлияет на динамику процесса упорядочения. Возможно, следовало бы рассмотреть больший размер ячейки для того, чтобы концентрация точечных дефектов была бы ближе к реально существующей при температуре ниже точки Курнакова.

4. В работе присутствует ряд неточностей в оформлении, в частности в унифицировании ссылок на рисунки и таблицы.

Указанные вопросы и замечания не снижают ценность выполненной Шараповым Евгением Анатольевичем работы, и не ставят под сомнение сформулированные в ней выводы. Результаты диссертации обоснованы, и опубликованы в ведущих профильных научных журналах, рекомендованных ВАК РФ, а также в зарубежных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus, в частности, имеется публикация в журнале Scopus квартиля Q2. Общее число публикаций по результатам диссертации - 7. Результаты прошли апробацию на научных конференциях. Автореферат полно и точно отражает содержание диссертации. Диссертационная работа является полноценным квалификационным исследованием и соответствует требованиям и паспорту специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния, а Шарапов Е.А. заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по этой специальности.

Я, Соколовский Владимир Владимирович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Официальный оппонент,
доктор физико-математических наук по
специальности 01.04.07 – Физика
конденсированного состояния,
доцент,
профессор кафедры физики
конденсированного состояния
ФГБОУ ВО Челябинского
государственного университета,
Адрес: 454001, г. Челябинск, ул. Братьев
Кашириных, 129
Телефон: 89514536929
e-mail: vsokolovsky84@mail.ru

Соколовский Владимир Владимирович

« 11 » мая 2021 г.

Подпись В.В. Соколовского заверяю:

