

Отзыв официального оппонента

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

Дефекты кристаллической решетки во многом определяют физические и механические свойства металлов и сплавов. Существует класс дефектов, реализуемый только в упорядоченных сплавах – так называемые сверхструктурные дефекты, которые не нарушают базовой решетки, но приводят к смене сортов атомов по сравнению с полностью упорядоченным состоянием. Планарные сверхструктурные дефекты (ПСД) возникают при движении в упорядоченном сплаве частичных дислокаций или при столкновении растущих доменов упорядоченной фазы в процессе упорядочения сплава. Наиболее простыми являются двойные сплавы, но уже для тройных систем сложность в их изучении существенно возрастает. В диссертации Шарапова Е.А. разработан аналитический подход к анализу структуры и энергии ПСД тройных сплавов на примере практически важных сплавов Гейслера со сверхструктурой $L2_1$. *Актуальность* данной работы вытекает из того, что сплавы Гейслера находят широкое применение в науке и технике благодаря разнообразию полезных эффектов, которые они проявляют: магнитокалорический, механокалорический и эластокалорический эффекты. Именно благодаря процессу упорядочения, за счет формирования новых химических соединений, сплавы Гейслера проявляют магнитные свойства даже при отсутствии в них известных магнитных элементов – никеля, железа или хрома. ПСД в сплавах Гейслера играют очень важную роль. Например, они являются центрами пиннинга



магнитных доменных стенок, обуславливают сверхструктурное упрочнение при пластической деформации. Для полного понимания свойств сверхструктурных дислокаций, определяющих пластичность сплава, и влияния ПСД на магнитные свойства сплавов необходима детальная информация о типах и энергии ПСД в сплавах Гейслера. Эти задачи решаются в рассматриваемой диссертационной работе.

Диссертация Шарапова Е.А. состоит из введения, четырех глав, заключения, двух приложений и списка литературы из 106 наименований, занимает 114 страниц текста, включая 4 таблицы и 21 рисунок. Охарактеризуем основные разделы диссертации.

Введение описывает объект исследования – семейство сплавов Гейслера и изучаемый предмет – структуру и энергию ПСД в данных сплавах, а также параметры порядка трехкомпонентных сплавов. Описаны цель и задачи исследования, отмечено соответствие работы требованиям ВАК в отношении новизны и практической значимости полученных результатов, отражена апробация работы и публикации по теме исследования, сформулированы основные положения, выносимые на защиту, отражен личный вклад соискателя в проделанную работу.

В первой главе дается обзор литературы по упорядоченным сплавам, теории фазового перехода порядок-беспорядок, описаны сплавы Гейслера, их фазовые переходы – мартенситный, магнитный и порядок-беспорядок и физические эффекты, связанные с этими переходами. Отмечается важность сплавов Гейслера для практики. Представлены основы метода Монте-Карло для моделирования диффузии в сплавах по вакансионному механизму. Дано понятие сверхструктурного дефекта в упорядоченных сплавах и приводится классификация ПСД. В заключении по главе обосновывается необходимость выполнения данной работы.

Во второй главе показано, что в сплаве Гейслера стехиометрического состава A_2BC на основе ОЦК решетки атомы располагаются вокруг любого выбранного атома в вершинах одного из семи правильных многогранников.

Приведены таблицы заполнения этих многогранников атомами различных сортов с указанием радиусов соответствующих координационных сфер. Далее, информация о соседстве атомов позволяет выписать выражение для расчета энергии сублимации сплава Гейслера через энергии парных взаимодействий. Из анализа данного выражения делается вывод об относительных вкладах различных парных взаимодействий в энергию сплава. На первой координационной сфере вклад в энергию сублимации дают только связи АВ и АС, во второй сфере появляется вклад от связей АА и ВС, а связи ВВ и СС дают вклад только начиная с 3-й координационной сферы.

В третьей главе анализируются возможные ПСД в сплавах Гейслера и их энергия. К сплаву Гейслера последовательно применяются сначала преобразования сдвига на решеточный вектор, а затем преобразования точечной симметрии – отражения от плоскостей симметрии, повороты вокруг осей симметрии и инверсия. Показано, что операции сдвига дают четыре типа домена сплава Гейслера, а преобразования точечной симметрии не дают новых типов доменов. Из этого делаются два вывода – в каждой плоскости возможно не более трех различных ПСД, и что все ПСД в сплавах Гейслера сводятся к сдвиговым и термическим антифазным границам. Проведен кристаллографический анализ и получена формула, позволяющая выписать полный список плоскостей, в которых возможны сдвиговые антифазные границы. Дается формула для расчета энергии любого ПСД в сплаве Гейслера. Анализируются выражения для энергий ПСД в плоскостях (001) и (011). Делается обоснованное предположение, что одни ПСД имеют энергию выше, чем другие, поскольку в них нарушение в расположении атомов происходит уже в первой координационной сфере, а в других – начиная со второй. Этот результат полезен для анализа расщепления сверхструктурных дислокаций, ведь предпочтительными будут те расщепления, которые приводят к сдвиговым антифазным границам с меньшей энергией. Это

знание полезно для анализа механизмов пластической деформации рассматриваемых сплавов.

Четвертая глава посвящена выводу параметров ближнего порядка произвольного трехкомпонентного сплава. Полученные соотношения обобщают известный результат для бинарных сплавов. Рассмотрена задача упорядочения трехкомпонентного модельного сплава по методу Монте-Карло, что позволило протестировать выражения для параметров ближнего порядка и объяснить их физический смысл.

В заключении описаны основные результаты и выводы.

В приложении 1 описан метод решения линейных алгебраических уравнений в целых числа, который используется в диссертационной работе. **В приложении 2** даны преобразования точечной симметрии кристаллов кубической симметрии, которые использовались при определении возможных доменов сплавов Гейслера.

Новизна работы состоит в следующем: для сплавов Гейслера впервые

- описано заполнение атомами различных сортов координационных сфер сплава;
- перечислены все плоскости, в которых возможны сдвиговые антифазные границ и показано отсутствие доменных границ, определяемых операциями точечной симметрии;
- рассчитана энергия произвольных сдвиговых и термических антифазных границ в модели жестких координационных сфер и парных взаимодействий;
- дано выражение параметров порядка для произвольного трехкомпонентного сплава.

Практическая значимость работы состоит в том, что ПСД оказывают существенное влияние на физические и механические свойства сплавов Гейслера, поэтому проведенная классификация ПСД и расчет их энергии важны для разработки новых и повышения свойств известных сплавов. Выражения параметров ближнего порядка трехкомпонентных сплавов,

полученные автором, важны при изучении фазовых переходов порядок-беспорядок. Развитые теоретические подходы являются достаточно общими и легко могут быть перенесены на анализ других семейств упорядоченных сплавов.

Выводы, сделанные по работе, являются *обоснованными*, а полученные результаты *достоверными*, поскольку они физически непротиворечивы и получены с использованием строгих математических методов.

В качестве замечаний по работе отмечу следующее:

1. Замечание общего характера состоит в том, что работе не хватает связи с практикой, развитая теория, несомненно, полезна и должна быть применена к анализу экспериментальных данных, к изучению конкретных сплавов Гейслера.
2. В ОЦК металлах основными плоскостями скольжения являются (011), (112) и (123). В работе же приведены и анализируются энергии ПСД только в плоскостях (001) и (011). Для анализа систем скольжения в сплавах Гейслера было бы логично вместо ПСД в плоскости (001), которая не является плоскостью скольжения, рассмотреть энергии дефектов в плоскостях (112) и (123).
3. Смущают бесконечные индексы суммирования в выражениях энергии сублимации сплава Гейслера и энергии ПСД. Можно ли сделать теоретические оценки диапазона индексов суммирования, достаточного для практики?

Несмотря на указанные недочеты в работе, она остается весьма важным этапом в изучении ПСД трехкомпонентных упорядоченных сплавов.

В целом, работа Шарапова Е.А. является цельным и завершенным научным трудом, в котором решена актуальная задача описания структуры и энергии ПСД в сплавах Гейслера. Полученные результаты оригинальны и имеют несомненную практическую ценность. Поставленные задачи решены, и сформулированная цель работы достигнута. Работа изложена ясным

научным языком, выстроена логично. Автореферат достаточно полно отражает основное содержание работы. Основные результаты опубликованы и достаточно хорошо апробированы на научных конференциях и семинарах. Работа соответствует паспорту заявленной специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Подводя итог, диссертация Шарапова Е.А. «Кристаллография и энергетика сверхструктурных планарных дефектов тройных упорядочивающихся сплавов на примере сплавов Гейслера» удовлетворяет всем требованиям пунктов 9-11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г., а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Я, Соловьева Юлия Владимировна, 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
ФГБОУ ВО "Томский государственный
архитектурно-строительный университет",
заведующий кафедрой физики, химии и
теоретической механики,
Почтовый адрес 634003, г. Томск, Соляная
площадь, 2
Контактный телефон +7 (3822) 65-42-65
Адрес электронной почты: physics@tsuab.ru

Соловьева Юлия Владимировна

Сведения и подпись Ю. В. Соловьевой удостоверяю

Проректор по научной работе ФГБОУ ВО ТАСУ

30.04.2021

К.Т.Н.



П.А. Елугачев