

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. проректора по научной и инновационной
деятельности Национального исследовательского

Томского государственного университета,

кандидато-минералогических наук



Краснова Татьяна Семеновна

» 12 мая 2021 г.

Отзыв ведущей организации

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Национальный исследовательский Томский
государственный университет» на диссертационную работу

Шарапова Евгения Анатольевича

«Кристаллография и энергетика сверхструктурных планарных дефектов
тройных упорядочивающихся сплавов на примере сплавов Гейслера»,
выдвигаемую на соискание ученой степени кандидата физико-математических
наук по специальности 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Диссертация Шарапова Евгения Анатольевича посвящена анализу структуры
и энергии планарных сверхструктурных дефектов (ПСД) в тройных сплавах
Гейслера стехиометрии A_2BC на основе сверхструктуры $L2_1$.

Актуальность работы. Фазовый переход порядок-беспорядок, наблюдаемый во многих сплавах состава близкого к стехиометрическому, приводит к существенному изменению их свойств. В упорядоченном сплаве существенно меняются условия скольжения дислокаций, за счет увеличения длины вектора Бюргерса полной дислокации и появления планарных сверхструктурных дефектов – сдвиговых антифазных границ (АФГ). В результате, в интерметаллидах может наблюдаться эффект сверхструктурного упрочнения и аномальный рост напряжения течения с увеличением температуры в определенном интервале температур. Эффект сверхструктурного упрочнения используется для создания жаропрочных сплавов. Во многих тройных сплавах Гейслера упорядочение приводит к появлению магнитных свойств, даже в отсутствии таких магнитных элементов как железо, кобальт и никель и, более того, наблюдается сильная корреляция в расположении ПСД и магнитных доменных стенок, что обуславливает возможность влияния процесса упорядочения на магнитные свойства сплавов.

В сплавах Гейслера наблюдается три типа фазовых переходов – это мартенситное превращение при тепловых или механических воздействиях,

Входящий ИПСИ

№ 304

от 18.05.21

В сплавах Гейслера наблюдается три типа фазовых переходов – это мартенситное превращение при тепловых или механических воздействиях, переход порядок-беспорядок выше температуры Курнакова и потеря магнитных свойств при температурах выше точки Кюри. Этим определяется сложность изучения физических и механических свойств данного семейства сплавов.

Сплавы Гейслера активно изучаются, поскольку они демонстрируют множество физических эффектов, которые могут использоваться в различных технологиях. К ним относятся механокалорический эффект, наблюдаемый за счет протекания упомянутого выше мартенситного превращения, магнитокалорический эффект, эластокалорический эффект, а также термоэлектрические эффекты Зеебека и Пельтье.

Поскольку ПСД оказывают существенное влияние на протекание пластической деформации и магнитные свойства сплавов Гейслера, представляется актуальным и важным детальное изучение их структуры и энергетических параметров. Для многих более простых бинарных сплавов подобные исследования проводились, но для тройных сплавов имеется лишь весьма ограниченное число работ. Диссертационное исследование Е.А. Шарапова направлено на восполнение существующего пробела.

Далее опишем содержание глав диссертации.

Первая вводная глава формулирует проблему описания структуры и энергетических характеристик сверхструктурных дефектов тройных упорядоченных сплавов на примере семейства сплавов Гейслера, для чего описаны базовые свойства сплавов, дается определение ПСД, их классификация, освещен эффект сверхструктурного упрочнения, даны основные сведения о фазовых переходах порядок-беспорядок и методе Монте-Карло для моделирования диффузии в сплавах. Заканчивается глава мотивацией проведенного исследования.

Во второй главе дается определение сверхструктуры L_2 , в виде объединения кубических моноатомных упаковок либо на основе минимального числа упаковок в форме наклонного параллелепипеда. Далее решены три задачи: во-первых, описана координация атомов в сплаве Гейслера, и представлено заполнение координационных многогранников вокруг произвольного атома сорта А, В и С. Во-вторых, дано аналитическое выражение энергии сублимации сплава Гейслера в терминах парных связей. Здесь и далее расчеты проводятся без учета атомной релаксации, то есть в предположении твердых координационных сфер. В третьих, описаны все возможные домены сплава Гейслера, их оказалось четыре, причем, все четыре могут быть полученными сдвигом пространства на решеточный вектор, а преобразования точечной симметрии не дают новых доменов. Из этого делается вывод о существовании в сплавах Гейслера только сдвиговых и термических АФГ, и отсутствии других видов ПСД. Кроме того,

установлено, что для любой плоскости залегания возможно не более трёх ПСД с различной энергией.

Третья глава посвящена анализу АФГ в сплаве Гейслера. Сначала устанавливается в каких плоскостях реализуются сдвиговые АФГ, а в каких термические. Получено аналитическое выражение для перечисления всех возможных плоскостей залегания сдвиговых АФГ, и приведён полный список таких плоскостей с индексами Миллера не старше 2. Следующий результат – это аналитическое выражение энергии произвольного ПСД в терминах энергий парных связей и без учета атомной релаксации. В качестве примера выписаны явные формулы для всех возможных ПСД в плоскостях (001) и (011). В полном соответствии с результатами главы 2, показано, что в плоскости (001) возможна одна сдвиговая АФГ и две термические АФГ с равными энергиями, в то время как в плоскости (011) все три ПСД являются сдвиговыми АФГ, у двух из них энергии совпадают.

Основным результатом **четвертой главы** является получение выражений параметров ближнего порядка в трехкомпонентном сплаве. Применение этих выражений проиллюстрировано при моделировании кинетики упорядочения трехкомпонентного сплава на квадратной решетке методом Монте-Карло. Параметры парных взаимодействий выбраны так, чтобы один компонент выделялся в чистом виде, а два других создавали домены с шахматным порядком. Знаки и значения параметров ближнего порядка позволили охарактеризовать кинетику упорядочения модельного сплава.

В завершении работы сформулированы основные **результаты и выводы**.

Научную новизну диссертации, посвященной анализу ПСД в тройных сплавах Гейслера, составляют:

1. Описание координации атомов различных сортов сплава.
2. Описание плоскостей залегания всех возможных сдвиговых антифазных границ; доказательство отсутствия доменных границ отличных от сдвиговых и антифазных АФГ; вывод аналитического выражения для расчета энергии произвольных сдвиговых и термических антифазных границ в модели жестких сфер и парных взаимодействий;
3. Вывод выражений параметров ближнего порядка для произвольного трехкомпонентного сплава.

Полученные результаты имеют **практическое значение**, поскольку, для обширного и практически важного семейства сплавов Гейслера установлены плоскости залегания сдвиговых АФГ, что важно для анализа активности систем скольжения сплава; посчитаны энергии АФГ, которые необходимы для анализа расщепления сверхструктурных дислокаций; выведены выражения параметров

ближнего порядка произвольного трехкомпонентного сплава, которые полезны при изучении кинетики упорядочения.

Достоверность полученных результатов и выводов опирается на использование автором строгих методов векторной алгебры и кристаллографии, проверкой полученных аналитических выражений путем численного счета, непротиворечивостью полученных результатов литературным данным и основным физическим принципам.

К работе имеется ряд замечаний:

1. Все вычисления сделаны автором в предположении парных взаимодействий, и пренебрегая эффектами релаксации атомов вблизи ПСД. Эти предположения оправданы, поскольку они позволили получить ряд важных результатов в аналитической форме. Однако не мешало бы на примерах оценить погрешности, обусловленные принятыми упрощающими предположениями.
2. Результаты расчета энергии сублимации, а также энергий ПСД, не доведены до числа. Работа бы выиграла, если бы эти энергии были рассчитаны для какого-нибудь конкретного сплава Гейслера. Появилась бы возможность сопоставить полученные энергии с экспериментальными данными.
3. Основной результат четвертой главы – выражения параметров порядка трехкомпонентного сплава были применены к анализу кинетики упорядочения модельного сплава на квадратной решетке. Что помешало автору применить их к какому-либо сплаву Гейслера?

Высказанные замечания могут быть учтены автором в дальнейшей работе, и они не умаляют ценности и важности полученных им аналитических результатов.

Характеризуя диссертационную работу Шарапова Евгения Анатольевича в целом, следует отметить, что она представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой представлены достоверные и научно-обоснованные результаты. Работа выполнена на высоком уровне, изложена ясным научным языком, хорошо проиллюстрирована. Все полученные результаты являются новыми и оригинальными. Сделанные выводы обоснованы и сомнений не вызывают. Тема исследования, несомненно, актуальна, и полученные выводы важны для практики. Публикации автора и автореферат отражают основное содержание работы. Работа соответствует заявленной специальности, она достаточно хорошо апробирована на научных форумах.

Заключение по работе. Диссертационная работа Шарапова Евгения Анатольевича представляет собой законченный научно-исследовательский труд,

выполненный на актуальную тему. Полученные результаты имеют научную и практическую ценность, обоснованы и достоверны.

Учитывая сказанное, можно констатировать, что диссертация Шарапова Е.А. «Кристаллография и энергетика сверхструктурных планарных дефектов тройных упорядочивающихся сплавов на примере сплавов Гейслера» соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, согласно п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г., а соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Диссертационная работа и настоящий отзыв обсуждены и одобрены на расширенном заседании Лаборатории наноструктурных поверхностей и покрытий «Национального исследовательского Томского государственного университета» 13.05.2021, протокол №1.

Профессор кафедры общей
и экспериментальной физики НИ ТГУ,
доктор физико-математических наук
(01.04.07 – физика конденсированного состояния),
профессор,



Потекаев Александр Иванович

Я, Потекаев Александр Иванович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

13.05.2021

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский Томский государственный университет»

634050, г. Томск, пр. Ленина, 36; (3822) 52-98-52; rector@tsu.ru; www.tsu.ru.