

ОТЗЫВ

научного консультанта на диссертационную работу

Зоря Ирины Васильевны «Взаимодействие атомов С, N, O, H с дефектами кристаллической решетки в ГЦК металлах на примере Ni, Ag, Al», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния

Диссертационная работа Зоря И.В. посвящена исследованию с помощью метода молекулярной динамики взаимодействия примесных атомов легких элементов С, N, O, H с различными дефектами кристаллической структуры ГЦК металлов.

Актуальность диссертационной работы обусловлена значительным влиянием примесей легких элементов на свойства металлов. Обладая малыми размерами по сравнению с размерами атомов металла, примесные атомы легких элементов эффективно взаимодействуют с дефектами кристаллической решетки металлов, оказывая влияние на подвижность дефектов и возможность их трансформации. В некоторых случаях дефекты выступают в качестве ловушек примесей, в других – наоборот, примеси тормозят или задерживают миграцию дислокаций, границ зерен, межузельных атомов. В настоящее время остается довольно много нерешенных вопросов, связанных с взаимодействием примесных атомов с различными дефектами кристаллической решетки на атомном уровне. Решение данных вопросов с помощью реальных экспериментов в настоящее время весьма затруднительно, поскольку для этого необходимы исследования динамики структуры на атомном уровне. В данном случае наиболее эффективным оказывается применение метода компьютерного моделирования.

Диссертация состоит из введения, семи глав, заключения и списка литературы из 419 наименований. Работа изложена на 332 страницах машинописного текста, содержит 21 таблицу и 118 рисунков.

Научная новизна диссертационной работы заключается в том, что впервые с помощью метода молекулярной динамики в рамках одного подхода проведено исследование взаимодействия примесных атомов легких элементов (С, N, O, H) с различными дефектами кристаллической структуры в ГЦК металлах. Построены потенциалы Морзе для описания взаимодействий атомов легких элементов С, N, O с атомами металлов Al, Ag, Ni. Рассчитаны энергии связи примесных атомов с

различными дефектами и найдены предпочтительные места расположения примесных атомов в рассматриваемых дефектах. Найдены зависимости порогового напряжения скольжения краевой дислокации в ГЦК металлах от концентрации примесных атомов. Изучено влияние примесей на диффузионную подвижность точечных дефектов и диффузионную проницаемость границ зерен и их тройных стыков. Изучены атомный механизм миграции границ наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ и влияние на скорость миграции границ концентрации примесных атомов. Проведено исследование и найден механизм влияния примесных атомов на скорость движения фронта кристаллизации в металлах.

Практическая значимость работы состоит в том, что полученные результаты могут быть использованы для развития теоретических представлений о взаимодействии примесных атомов легких элементов с дефектами в металлах, для создания математических моделей скольжения дислокаций, диффузии, миграции границ зерен, кристаллизации, учитывающих закономерности и количественные характеристики, найденные в настоящей работе. Построенные в настоящей работе потенциалы могут быть использованы в дальнейших исследованиях с помощью компьютерного моделирования взаимодействия примесей с металлами. Кроме того, результаты молекулярно-динамических исследований могут быть использованы в качестве демонстрационного материала для студентов физических специальностей, на их базе возможно создание работ для лабораторного практикума.

Достоверность результатов обеспечивается применением известных и апробированных методик (метод молекулярной динамики, методика определения параметров потенциалов межатомного взаимодействия), их физической непротиворечивостью, сравнением результатов с данными других авторов (там, где это возможно).

Личный вклад соискателя состоит в выполнении исследований, анализе полученных результатов и их интерпретации, написания статей, тезисов докладов и подготовке их к публикации.

Результаты и выводы диссертационной работы Зоря И.В. достоверны и имеют научную и практическую ценность. Защищаемые положения отражены в выводах диссертации. Работа достаточно апробирована, материалы докладывались на международных и российских конференциях. По теме диссертации опубликовано 69 статей, из которых 52 – в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ, в том

числе 31 – в журналах, индексируемых в Web of Science и Scopus. Содержание автореферата соответствуют содержанию диссертационной работы.

За период проведения исследования Зоря И.В. проявила себя высококвалифицированным, вдумчивым и трудолюбивым исследователем, способным самостоятельно ставить и решать оригинальные задачи. По объему и актуальности выполненных исследований, новизне и практической значимости, количеству публикаций диссертация Зоря Ирины Васильевны «Взаимодействие атомов С, N, O, H с дефектами кристаллической решетки в ГЦК металлах на примере Ni, Ag, Al» удовлетворяет требованиям ВАК РФ, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Я, Полетаев Геннадий Михайлович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Научный консультант

ведущий научный сотрудник,
заведующий кафедрой высшей математики
и математического моделирования
ФГБОУ ВО «Алтайский государственный
технический университет им. И.И. Ползунова»
(656038, Алтайский край, г. Барнаул, пр. Ленина, 46;
+7(3852)290710; altgtu@list.ru; www.altstu.ru),
доктор физико-математических наук
(1.3.8 – физика конденсированного состояния),
профессор
e-mail: gmpoletaev@mail.ru
тел.: +7 5

Полетаев Геннадий Михайлович
18.02.2022

Подпись заверяю:

Начальник управления кадров и
документационного обеспечения АлтГТУ

С.А. Химочка