

Відгук
офіційного опонента
на дисертацію А.І.Баштової
«Моделювання просторової організації точкових дефектів в опромінюваних системах»,
подану на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук
за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика

Актуальність теми досліджень, проведених у поданій дисертаційній роботі пов'язуються із вивченням та з'ясуванням властивостей поведінки ансамблів дефектів у твердотільних системах, що зазнають сталої дії опромінення високоенергетичними частинками. У дисертації проводиться послідовне розв'язання існуючих теоретичних положень щодо опису процесів кластеризації та структуроутворення точкових дефектів, виходу лінійних дефектів на межі поділу фаз та процесів пороутворення. Відомо, що досліджувані процеси істотно впливають на стійкість матеріалів, зміну їх фізико-механічних властивостей, тому відповідні дослідження набувають особливої актуальності, зокрема, в області прогнозування поведінки та стійкості конструкційних матеріалів, що все більше використовуються в атомній енергетиці та при створенні нових матеріалів для реакторів нового покоління, здатних витримувати великі дози опромінення. Важливим з точки зору теоретичної фізики постають задачі про стійкість фаз у конструкційних матеріалах, встановлення особливостей утворення вакансійних скупчень, що переростають у пори та дислокаційні петлі, вплив дефектної структури на локальну зміну хімічного складу, що пов'язується з утворенням та розчиненням преципітатів. Низка таких задач розв'язується у дисертаційній роботі А.І.Баштової за рахунок узагальнення та вдосконалення відомих теоретичних підходів, що активно використовуються на сьогодні в області моделювання радіаційних пошкоджень та мікроструктурних перетворень у конструкційних матеріалах. Із фундаментальної точки зору важливість досліджень проведених у дисертаційній роботі пов'язана з вивченням фізичних закономірностей виникнення кластерів вакансій, їх просторового розподілу, внеску нерівноважних дефектів на процеси поділу фаз, з'ясування впливу рухомих дислокацій невідповідності на сценарій випадіння та розчинення преципітатів. Тому, із вищенаведеного випливає, що тема дисертаційних досліджень А.І.Баштової є вельми актуальною не лише в теоретичній фізиці, фізиці твердого тіла, але й в прикладному сенсі, наприклад, в області радіаційного матеріалознавства. Про актуальність роботи також свідчить те, що вона була виконана відповідно до держбюджетних тем (0116U005851, 0111U010614, 0115U004688, 0115U005810, 0117U003561).

Метою роботи є розв'язання послідовного опису процесів кластеризації дефектів, утворення дислокаційних петель, пор та проходження фазового розшарування при перерозподілі точкових і лінійних дефектів за сталої дії опромінення. До основних завдань дослідження відносилось встановлення впливу взаємодії вакансій на процеси утворення вакансійних кластерів за рахунок виникнення деформаційних нестійкостей, виявлення умов зміни процесів фазового розшарування на процеси структуроутворення у опромінюваних твердих бінарних розчинах та з'ясування статистичних властивостей ансамблів дефектів за наявності флуктуацій швидкості радіаційних пошкоджень.

За структурою робота складається із Вступу, п'яти розділів, Висновків та Списку використаних джерел. У Вступі авторкою лаконічно наведено актуальність, мету, наукову новизну, розкрита практична цінність результатів та особистий внесок.

У першому розділі наведені основні експериментальні дані, що характеризують об'єкт та предмет дослідження; наведено методи моделювання радіаційних ефектів, зазначено межі їх реалізації та проводиться короткий опис результатів отриманих у попередніх дослідженнях іншими авторами. Розділ завершується переліком відкритих проблем, що потребують детального вивчення та входять до завдань дослідження. Розв'язання цих завдань проводиться у наступних чотирьох оригінальних розділах дисертації, які логічно пов'язані між собою і подають дисертаційну роботу, як закінчену наукову працю.

У другому розділі, за рахунок використання швидкісної теорії, авторкою вивчається вплив деформаційних нестійкостей на процеси формування вакансійних кластерів за різних режимів опромінення. У якості класу досліджуваних систем вибирається чистий матеріал, зокрема нікель,

опромінення якого моделюється за реакторних умов та на прискорювачах. Тут встановлено, що флуктуації швидкості набору дози прискорюють процеси структурної організації дефектів та уповільнюють динаміку росту міжвузлових петель. У середньопольовому наближенні отримано залежність критичного пересичення вакансій від температури та швидкості пошкоджень, вище якого відбувається формування вакансійних скупчень. Наведено оцінки розмірів вакансійних кластерів, які узгоджуються з експериментальними даними для ОЦК металів та проведено порівняння середньостатистичного періоду розташування кластерів за різних режимів опромінення.

Наступний розділ присвячено встановленню впливу деформаційних нестійкостей та температурних збурень на характер просторової організації точкових дефектів у опромінюваних тонких металевих плівках. Доволі оригінальним є результат про проходження процесів структур та неоднорідний розподіл температури в околі вакансійних скупчень. Авторкою показано, що осциляційний характер динаміки спостережуваних величин, зокрема середнього розміру та кількості вакансійних скупчень обмежується флуктуаційною компонентою швидкості пошкоджень, а розмір структур на 30% менше дифузійної довжини.

У четвертому розділі досліджується вплив опромінення та його стохастичної складової на динаміку росту вакансійних пор в об'ємі матеріалу. Тут наведено оцінки розпухання, коли домінуючими стоками точкових дефектів є дислокації або пори, проведено числовий аналіз та указана характерна відмінність впливу цих стоків на динаміку росту пор. Також у розділі запроваджується узагальнення теорії Ліфшиця-Сльозова-Вагнера, де з'ясовано залежність скейлінгових характеристик процесів росту пор від швидкості пошкоджень при універсальній динаміці середнього розміру пори з показником росту Ліфшиця-Сльозова.

Останній розділ роботи складається із двох підрозділів, в яких розглянуто процеси перерозподілу вакансій у твердому розчині за рахунок узагальнення теорії Кана-Хільярда та підходу Даркена, а також встановлено вплив дислокацій невідповідності та структурного безладу, індукованого опроміненням, на процеси випадіння фаз. До основних результатів цього розділу можна віднести: заміна фазового розшарування процесами структуроутворення за рахунок вакансійного механізму та конструктивну роль дислокацій невідповідності разом з кореляційними ефектами балістичного потоку перемішування атомів при поділі фаз.

Матеріал дисертаційної роботи викладено послідовно та логічно поєднано, отримані теоретичні результати порівнюються з експериментальними даними. Текст роботи оформлено у відповідності вимогам ДАК МОН України щодо кандидатських дисертацій.

Обґрунтованість наукових результатів підтверджується використанням методів математичного та числового моделювання, застосуванням відомих та апробованих підходів статистичної фізики, теорією швидкісних реакцій, теорії фазових переходів Ландау, теорії середнього поля Вейса, теорією Кана-Хільярда, Ліфшиця-Сльозова-Вагнера, підходу Даркена та новітніх методів досліджень мікроструктурних перетворень. Отримані оригінальні результати у граничних випадках зводяться до вже відомих, а також узагальнюють відомі теоретичні дані щодо опису процесів еволюції дефектної структури. У зв'язку з цим достовірність основних положень дисертації не викликає сумніву.

Однак, до змісту поданої роботи можна навести такі **зауваження**:

1. У роботі вилучається концентрація міжвузлів, як швидка мода, хоча доцільно було б розглядати концентрацію вакансій і міжвузлів, як моди одного часового масштабу зміни.
2. У першому розділі модельним матеріалом є нікель, який здатен до утворення газонаповнених пор, однак в дисертації цю особливість нікелю не розглянуто.
3. Флуктуації швидкості пошкоджень вибираються у вигляді Гаусівського шуму, натомість доцільно було б скористатися процесом Пуассона, оскільки він більш фізично відображає картину пошкоджень.
4. У розділі 5.2 для подання повної картини перерозподілу дислокацій слід було б дослідити еволюцію поля вектора Бюргера, а не обмежитися лише розглядом функції Ейрі.

Щодо оформлення тексту дисертації є такі недоліки:

1. Не подається детальна процедура отримання деяких формул (2.22, 3.7, 4.3, 4.14, 5.37), не наведено отримання показників стійкості в розділі 5.1.2.
2. Оригінальна частина має чотири розділи, які можна було б поєднати у три.
3. У тексті роботи присутні описки та порушення правил синтаксису.

Однак вважаю, що наведені зауваження та недоліки не знижують високого наукового рівня отриманих дисертанткою результатів та не впливають на наукову новизну роботи. Вважаю, що дисертація А.І.Баштової є завершеною науковою працею. Отримані результати опубліковано у 7 статтях у провідних фахових виданнях, що входять до науково метричних баз даних Scopus та Web of Science та 7 тезах доповідей профільних всеукраїнських і міжнародних конференцій. Результати, що були отримані авторкою, можуть бути використані для подальшого дослідження процесів мікроструктурних перетворень в матеріалах, що піддаються сталій дії опромінення, а також можуть бути використані при виборі сплавів для прогнозування стійкості матеріалів, що використовуються в атомній енергетиці.

Автореферат дисертації адекватно віддзеркалює суть та зміст дисертаційної роботи, хоча інколи і доволі лаконічно, в ньому подано основний математичний апарат та необхідні ілюстрації, що чітко демонструють основні результати роботи.

У цілому, вважаю, що роботу виконано на високому науковому рівні, за глибиною та об'ємом проведених досліджень дисертація Анни Іванівни Баштової є завершеним самостійним дослідженням (в рамках поставленої задачі), в якій набула подальшого розвинення теорія мікроструктурних перетворень та радіаційних пошкоджень в кристалічних системах. У дисертаційній роботі вирішено поставлені завдання, щодо опису процесів структуроутворення в опромінених твердотільних системах. Авторкою отримано низку нових науково-обґрунтованих результатів щодо процесів утворення вакансійних кластерів дефектів, дислокаційних петель, пор вакансійного типу та проходження процесів фазового розшарування з вакансійним та дислокаційним механізмами. Отримані результати становлять інтерес не лише для теоретичної фізики конденсованого стану, фізики нерівноважних явищ, але й для фізики твердого тіла та радіаційного матеріалознавства.

Із наведеного вважаю, що за актуальністю теми, науковим рівнем і новизною, практичним значенням одержаних результатів та їх кількістю дисертація «Моделювання просторової організації точкових дефектів у опромінюваних матеріалах» задовольняє критеріям ДАК МОН України, щодо дисертацій на здобуття наукового ступеня кандидата наук, а саме, пп. 9, 10, 12, 13 «Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24.07.2013 р. № 567 із змінами (окрім п. 3), що внесені до постанов Кабміну України, затвердженими постановою Кабміну України від 12.09.2011 р. № 955), а її авторка Анна Іванівна Баштова безумовно заслуговує на присудження їй наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика.

Офіційний опонент

доктор фізико-математичних наук, професор,
завідувач відділом теорії конденсованого стану речовини
Інституту монокристалів НАН України

В. В. Яновський

Підпис офіційного опонента д.ф.-м.н., проф. В. В. Яновського засвідчую.

Вчений секретар
Інституту монокристалів НАН України,
кандидат фізико-математичних наук



К.М.Кулик

19.06.2018