

ОТЗЫВ

Официального оппонента д.ф.-м.н. Егранова Александра Васильевича на диссертационную работу Сангадиева Сергея Шойжинимаевича "Переход жидкость - стекло и вязкоупругие свойства аморфных веществ в модели делокализованных атомов", представленную к защите на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Актуальность темы. Аморфное стеклообразное состояние вещества (как одна из форм твердого агрегатного состояния) широко распространено в природе. Все вещества, за исключением гелия, принципиально могут быть переведены в это состояние. Исследования аморфных веществ развиваются применительно к трем основным классам стеклообразных систем практически независимо: неорганические стекла, аморфные органические полимеры и металлические стекла. Вместе с тем наблюдается много общего в процессе стеклования и вязкоупругих свойствах этих классов стекол, хотя они по морфологиям структур различны. Представляет интерес комплексный подход к проблеме стеклообразного состояния, основанный на совокупном рассмотрении различных классов стекол с единых позиций.

Цель диссертационной работы. В диссертации предлагается развитие модели делокализованных атомов применительно главным образом к переходу жидкость – стекло и к вязкоупругим свойствам аморфных веществ в области стеклования – процесса, обратного размягчению стекла.

Структура и основное содержание работы.

Диссертация состоит из введения, девяти глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 184 страницы с 36 рисунками и 21 таблицами. Список литературы содержит 248 наименований. В диссертации сформулировано пять защищаемых положений.

В первой главе обсуждается современное состояние физики стеклообразного состояния вещества, перехода жидкость – стекло, кратко изложены основные положения модели делокализованных атомов аморфных веществ, которая используется в данной работе.

Во второй главе приводятся измерения продольной и поперечной скоростей ультразвука в аморфных полимерах и неорганических стеклах. На основе полученных данных о скоростях ультразвука и плотности рассчитаны упругие постоянные (коэффициент Пуассона и модули упругости) для ряда исследуемых веществ.

В третьей главе рассматривается понятия о свободном объеме аморфных веществ в рамках модели делокализованных атомов.

Четвертая глава посвящена разработке критерия перехода стекло– жидкость в рамках модели делокализованных атомов с привлечением идеи, заложенной в известном правиле плавления кристалла по Линдемману. В этой главе сформулирована часть третьего защищаемого положения.

В пятой главе рассмотрены интерпретация уравнения стеклования в рамках модели делокализованных атомов и особенности температурного интервала, в котором происходит стеклование жидкости. Предлагается новое условие перехода жидкость – стекло, устанавливающее связь между скоростью охлаждения расплава q , температурой стеклования T_g и временем структурной релаксации t_g при T_g . В этой главе сформулировано первое и второе защищаемые положения.

В **шестой главе** обсуждается вязкость стекол и их расплавов. Вязкость является принципиально важным свойством, определяющим специфику стеклообразного состояния.

Седьмая глава посвящена исследованию взаимосвязи модуля упругости E и температуры стеклования T_g аморфных полимеров и стекол. Установлено, что между E и T_g наблюдается линейная корреляция.

В этой главе сформулирована часть третьего защищаемого положения.

В **восьмой главе** с привлечением модели делокализованных атомов рассмотрены ангармонизм и упругие свойства стеклообразных твердых тел. Обсуждается природа взаимосвязи между гармоническими (линейными) и ангармоническими (нелинейными) свойствами твердых тел.

В этой главе сформулировано пятое защищаемое положение.

Девятая глава посвящена рассмотрению эффекта пластичности стекол в рамках модели делокализованных атомов. В этой главе сформулировано четвертое защищаемое положение.

Научная и практическая значимость. Полученные результаты имеют не только научное значение в проблеме стеклообразного состояния, они могут быть использованы на практике, например, в качестве справочных материалов. Они найдут применение в учебном процессе вузов, например, в спецкурсах «Физика неупорядоченных систем» и «Введение в физику твердого тела».

Научная достоверность результатов подтверждается согласием теоретических расчетов с экспериментальными данными.

Достоверность и обоснованность полученных результатов диссертационного исследования подтверждена совокупностью применяемых в работе апробированных физических методов, выбором адекватных теоретических моделей, систематическим характером экспериментальных исследований с применением современного научного оборудования и поверенных средств измерений, воспроизводимостью полученных результатов и анализом погрешностей измерений.

Основные результаты диссертационной работы были получены и прошли экспертную оценку в рамках реализации ряда проектов.

Замечания общего характера по диссертационной работе.

- Автор использует модуль упругости как один из параметров, характеризующих стекло в различных зависимостях, в то время как в литературе (особенно в зарубежной) в подобных случаях чаще пользуются модулем сдвига, который в общем случае лучше подходит для подобных целей так как на прямую связан с вязкостью, пластичностью и в предельном случае с хрупкостью и, следовательно, с температурой стеклования. Имеется ли связь в случае стекол между этими параметрами, и как изменятся зависимости, если использовать модуль сдвига вместо модуля упругости.

- Коллектив, в котором работает автор, долгое время занимается вопросами, связанными с выяснением параметров, характеризующих структуру и свойства стекла. Поэтому значительную часть цитируемой литературы составляют публикации этого коллектива, но в то же время очень бедно приставлены результаты зарубежных ученых, особенно в современных публикациях. С созданием объемных металлических стекол, а это произошло сравнительно недавно – несколько десятков лет назад, резко возросло

количество публикаций как по этим стеклам, так и по общим вопросам связанных со свойствами стекла, а в диссертации это не нашло отражение. Вследствие такой ситуации можно было бы ожидать дисбаланса между мировым уровнем исследований и результатами данного коллектива. Но к удивлению, этого не случилось, по крайней мере, пока. В некоторых случаях даже автор был первым в некоторых существенных вопросах. В частности, в предложении использовать флуктуационный объем (flexibility volume - в английском варианте) вместо часто используемого в литературе свободного объема. Первые публикации автора по этому вопросу появились в 1998-1999 годах, в то время как в зарубежной литературе к этому приходят только в настоящее время (например, Ding, J., Cheng, Y. Q., Sheng, H., Asta, M., Ritchie, R. O., & Ma, E. (2016). Universal structural parameter to quantitatively predict metallic glass properties. *Nature communications*, 7(1), 1-10). Однако едва ли сложившуюся ситуацию можно считать нормальной.

- в третьем защищаемом положении утверждается, что отношение предельного среднеквадратичного смещения атома к среднему межатомному расстоянию равно универсальной постоянной. В чем состоит эта универсальность совершенно не понятно. При оценке величины этой постоянной автор ссылается на стороннюю работу, а также на метод молекулярной динамики без всякой ссылки и описания как это было сделано (стр.56 диссертации). Более того в пятом защищаемом положении это отношение связано с ангармонизмом колебаний решетки, которое едва ли можно считать постоянным и тем более универсальным. Третье защищаемое положение состоит из двух частей – первая часть описана в главе 4 (стр.56), а вторая – в седьмой главе. Насколько связаны эти части не совсем понятно. Во - второй части этого защищаемого положения утверждается, что отношение температуры стеклования к модулю упругости стекол одного класса является постоянной величиной. Это хороший результат, который в настоящее время подтверждается исследованиями на металлических стеклах (но с модулем сдвига) и считается, что исследования в этом направлении могут привести к тем соотношениям, по которым можно будет прогнозировать свойства стекол. По-видимому, можно было бы оставить только эту часть в защищаемом положении.

- в пятом защищаемом положении приводится формула устанавливающая связь между относительной деформацией межатомной связи и параметром Грюнайзена, которой нет в описательной части автореферата, а есть только в диссертации.

В настоящее время проводятся интенсивные исследования для понимания необычных структур и свойств металлических стекол. Металлическое стекло - материал, к которому мы еще не готовы. Несмотря на постоянные поиски, до сих пор не удалось установить количественные соотношения структура-свойство, которые бы являлись универсальными для металлических и для других стекол тоже. Это положение значительно отличается от того, что известно для обычных кристаллических металлов, для которых многие предсказательные соотношения были известны на протяжении многих лет, что стало краеугольным камнем материаловедения как дисциплины. Например, в учебниках можно найти законы для предсказания прочности и пластического течения сплава. Ключевыми параметрами в этих соотношениях, часто являются модуль сдвига и характеристики дефектов, такие как плотность дислокаций и вектор Бюргерса (вектор искажения решетки). Ничего подобного пока нет для стекол, хотя и появляются статьи об универсальных структурных параметрах для количественного прогнозирования свойств металлических стекол. Насколько они универсальны, покажет время. В диссертации приводятся большое количество разных зависимостей, которые выглядят достаточно непротиворечиво, однако автор не разделяет их по приоритетам. Естественно встает вопрос, если среди них такие, которые можно было отнести к универсальным для

предсказания свойств стёкол (в частности, прочности или пластичности и т.д.) аналогично тому, что известно для кристаллических и поликристаллических материалов, и которые в дальнейшем могли бы войти в программы по материаловедению. И как автор видит, в общем случае, решение этих проблем и какие универсальные параметры нужны для предсказания свойств стекла.

- В автореферате на стр. 28 ссылки на литературу не вынесены в список цитируемой литературы в конце автореферата, а сделаны в тексте.

Перечисленные замечания не снижают ценность работы и не затрагивают основного содержания диссертации, а, скорее, указывают возможные направления дальнейшего развития этих исследований.

Заключение.

Диссертационная работа Сангадиева Сергея Шойжинимаевича выполнена на высоком научном уровне и представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, в которой содержится решение задачи, имеющей существенное значение для физики конденсированных сред и физического материаловедения. Представленная в диссертации совокупность научных результатов вносит существенный вклад в понимание физических свойств стекол.

Автореферат диссертации и опубликованные работы автора отражают научную новизну и содержание работы.

Диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям, изложенным в пп. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденном Постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 г. № 842 и соответствует формуле специальности 01.04.07 -Физика конденсированного состояния и областям исследований № 1, 4-6, сформулированным в паспорте этой специальности.

Считаю, что диссертационная работа "Переход жидкость - стекло и вязкоупругие свойства аморфных веществ в модели делокализованных атомов" по актуальности, научному уровню, объему решаемых задач и завершенности исследований отвечает всем критериям Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор, Сангадиев Сергей Шойжинимаевич, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 «физика конденсированного состояния».

Официальный оппонент

Егранов Александр Васильевич

доктор физико- математических наук (01.04.07 – Физика конденсированного состояния)

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки

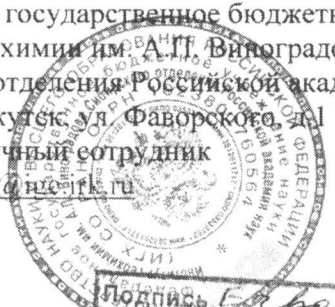
Институт геохимии им. А.П. Виноградова

Сибирского отделения Российской академии наук (ИГХ СО РАН)

664033 г. Иркутск, ул. Фаворского, д.1 "А" +7(3952)426600

Ведущий научный сотрудник

e-mail: alegra@igx-irk.ru



Подпись *Егранов А.В.*
ЗАБЕРЯЮ *Егранов А.В.*
Зав. канцелярией
ИГХ СО РАН *Егранов А.В.*

Егранов А.В.

02.06.2021