

ОТЗЫВ

**официального оппонента на диссертационную работу
Афашагова Анзора Артуровича «Термодинамические свойства плоской
и искривленной границы раздела конденсированных фаз в бинарных
металлических системах», представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
1.3.8 - Физика конденсированного состояния**

Актуальность работы

Результаты исследований, посвященные термодинамическим свойствам межфазных границ раздела конденсированных фаз в металлических системах, находят широкое применение при решении ряда научно-технических задач (пайка, нанесение покрытий, модификация сплавов, создание новых материалов с прогнозируемыми свойствами и т.п.). При решении подобных задач приходится учитывать влияние компонентов на состав и свойства материалов. Особый интерес представляет вопрос нахождения поверхностного и межфазного натяжения в виду того, что эта величина необходима для расчета многих поверхностных характеристик (адгезии, адсорбции, краевых углов смачивания и других). При этом, наиболее разработанными в наши дни являются подходы для изучения поверхностного натяжения на плоской границе раздела фаз, в то время как изучение искривленных границ раздела является менее изученным. Это связано с трудностями нахождения составов контактирующих фаз и межфазного слоя с одновременным учетом межчастичных взаимодействий компонентов системы и размера. Для сплавов размерные эффекты могут приводить к эффектам межфазной сегрегации и фазовым переходам, что затрудняет нахождение термодинамических свойств границ раздела. Так, в настоящее время отсутствует общий подход для описания влияния наноразмерных эффектов на основные свойства бинарных и многокомпонентных систем.

В связи с этим, диссертационная работа Афашагова Анзора Артуровича «Термодинамические свойства плоской и искривленной границы

раздела конденсированных фаз в бинарных металлических системах» представляет большой интерес и посвящена актуальной теме.

Целью диссертационной работы являлось получение соотношений для зависимостей термодинамических свойств от основных параметров состояния системы и размерного фактора на плоской и искривленной границах раздела конденсированных фаз в бинарных металлических системах. Среди этих свойств фигурируют поверхностное и межфазное натяжение, составы и термодинамические активности компонентов в объемных фазах и межфазном слое.

Общий обзор диссертационной работы

Представленная диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы, который состоит из 121 наименования. Весь материал изложен на 141 странице, содержит 27 рисунков и 21 таблицу.

Во введении автор обосновывает актуальность выбранной темы исследования, освещает степень ее разработанности, формулирует цель и задачи диссертационной работы. Также во введении приводится научная новизна, теоретическая и практическая значимость работы и приводятся основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава посвящена обзору работ по исследованию плоских и искривленных границ раздела между конденсированными фазами. При этом сначала автор кратко приводит основные характеристики поверхностного слоя и фундаментальные уравнения, описывающие зависимость межфазного натяжения от основных параметров состояния системы. Соискатель делает вывод о том, что наиболее значимыми являются уравнения, полученные А.И. Русановым, которые имеют дифференциальную форму и, в связи с этим, затруднительно их использование на практике. В обзоре отмечается недостаточное количество уравнений изотерм межфазного натяжения для бинарных и многокомпонентных систем с искривленными границами раздела конденсированных фаз.

Хочется отметить, что автор в обзоре достаточно полно изложил существующее на сегодняшний день состояние вопроса по изучению термодинамических свойств плоских и искривленных границ раздела фаз, а также по вопросам термодинамической теории построения диаграмм состояния в макроскопическом случае и с учетом размерного фактора. В конце главы приведены наиболее общие задачи, которые поставлены в диссертационной работе.

Во второй главе автор получает соотношение для межфазного натяжения на плоской границе раздела двух конденсированных фаз для бинарных систем. При этом для нахождения зависимостей молярных площадей и объемов от концентраций применяется разложение в ряд Тейлора по активностям. Искомое уравнение получается в точной форме, за рамками приближения жесткой системы. Для его вывода используется метод слоя конечной толщины. Однако проведение численных расчетов с использованием этого уравнения сопряжено с определенными трудностями и соискатель получает его в приближенной форме, учитывая, что члены разложения в ряд Тейлора по активностям во второй степени намного меньше единицы. Получаемое в итоге уравнение изотермы межфазного натяжения на границе раздела конденсированных фаз в приближенной форме наиболее удобно для проведения численных расчетов, которые затем соискатель проводит для ряда бинарных индиевых систем.

В этой же главе диссертации соискатель получает выражения для нахождения составов и термодинамических активностей в контактирующих α и β -фазах и межфазном слое σ . По ним также проведены численные расчеты для тех же бинарных систем.

Во второй главе автор также получает уравнение изотермы поверхностного натяжения бинарных систем. При этом, новым является тот факт, что в нем нет явного параметра, который отвечает за межчастичное взаимодействие в поверхностном слое. Это очень удобно для проведения численных расчетов. Такие расчеты для концентрационной зависимости

состава поверхностного слоя жидких растворов бинарной системы Ag-Pb при определенной температуре были успешно проведены. Было установлено, что Ag является поверхностно-инактивным компонентом в жидком расплаве с Pb.

Во второй главе также находился состав и межфазное натяжение на границе двух несмешивающихся жидких растворов в приближении субрегулярных растворов. Как известно, такие системы интересны тем, что в них протекают монотектические процессы, когда в равновесии находятся три фазы – одна в твердом состоянии, а две – в жидком. С использованием полученных соотношений было рассчитано межфазное натяжение на плоской границе двух жидких растворов в системе Al-In. Автор провел сравнение с экспериментальными данными, которые показали, что наилучшее совпадение достигается при учете температурной зависимости межфазного натяжения. При возрастании температуры расхождение между данными увеличивается. Автор связывает это с выбранной моделью субрегулярных растворов и входными данными по температуре и составам сосуществующих фаз. Кроме этого, было принято условие, что число монослоев равно 2 при всех температурах. Если же учесть зависимость числа монослоев от температуры по линейному закону, то можно добиться лучшего согласия с экспериментом.

Третья глава диссертации посвящена изучению термодинамических свойств искривленной границы раздела конденсированных фаз. Соискатель рассматривает бинарную систему, которая состоит из α и β – фаз. При этом α -фаза – это наночастица, а β -фаза – матрица. Система находится в термодинамическом равновесии при постоянной температуре. Автор решает задачу нахождения влияния размерного фактора на параметры состояния термодинамической системы в рамках термодинамики гетерогенных систем с искривленными границами раздела. Для этого он использует метод разделяющих поверхностей Гиббса, где в качестве разделяющей поверхности выбирается поверхность натяжения γ . Автор получает уравнение изотермы межфазного натяжения наночастицы, находящейся в матрице в бинарной

системе в дифференциальной форме. Затем он интегрирует его с использованием модели идеального раствора и модели абсолютно жесткой системы. При проведении численных расчетов в качестве входных данных по составу были использованы подобранные наиболее надежные экспериментальные данные. Была рассчитана зависимость межфазного натяжения от размера для бинарных систем и Fe-Cr, Cr-Ti и Zr-Nb. Для макроскопического случая наблюдалось хорошее совпадение с имеющимися в литературе экспериментальными данными. Для наночастиц было сложно провести аналогичное сравнение в виду отсутствия таких данных. Однако при этом качественный ход зависимости $\sigma(r)$ совпал с выводами других авторов.

Четвертая глава диссертации посвящена нахождению соотношений для составов объемных фаз, которые находятся в равновесии при разных температурах. В системе отсутствуют внешние силовые поля и не протекают химические реакции. В случае равновесия двух конденсированных фаз в бинарных и многокомпонентных системах наибольший интерес для практики представляют сведения, полученные при постоянстве давления в одной из фаз (в β -фазе). Это связано с тем, что фазовые диаграммы состояния представляют собой изобарические разрезы трехмерных диаграмм состояния плоскостью $P=\text{const}$. По полученным соотношениям были рассчитаны макроскопические диаграммы состояния бинарных систем Ag-Vi и Al-In, которые продемонстрировали хорошее совпадение с экспериментальными диаграммами состояния.

Кроме этого, с помощью полученных соотношений, соискатель рассчитал кривые растворимости для бинарной системы Mo-Ru и построил трехмерные графики зависимости состава от размера и температуры.

В заключении диссертации излагаются основные выводы по проведенному исследованию.

Оценка новизны и достоверности диссертации Афашагова А.А.

определяется следующими основными моментами:

1. Уравнение межфазного натяжения для плоской границы раздела между конденсированными фазами впервые получено в точной форме, за рамками приближения жесткой системы.

2. Соотношения для составов и термодинамических активностей компонентов в объемных фазах и плоском переходном слое, позволяющие рассчитывать эти характеристики на всем концентрационном интервале, впервые получены с учетом зависимостей парциальных величин от термодинамических активностей компонентов.

3. Уравнение изотермы межфазного натяжения наночастицы, находящейся в матрице для бинарной системы, а также выражения для составов контактирующих фаз и межфазного слоя на этой же границе получены впервые.

4. Получены новые соотношения для составов объемных фаз в бинарных системах с искривленными границами раздела, лежащие в основе термодинамической теории построения диаграмм состояния двойных металлических систем для макроскопического случая и с учетом размерных эффектов.

5. С использованием полученных в работе выражений проведены численные расчеты термодинамических свойств (а именно, поверхностного и межфазного натяжения, составов и термодинамических активностей компонентов объемных фаз и межфазного слоя) плоских и искривленных границ раздела конденсированных фаз для ряда бинарных металлических систем, а также построены фазовые диаграммы состояния для двойных металлических систем в макроскопическом случае, которые дали хорошее согласие с экспериментальными данными.

6. С помощью установленных новых соотношений для зависимостей составов контактирующих фаз от размера рассчитана взаимная растворимость в твердом состоянии в бинарной металлической системе.

Теоретическая и практическая ценность полученных в работе результатов, определяется их использованием для нахождения основных термодинамических характеристик плоской и искривленной границы раздела конденсированных фаз. Полученные соотношения могут быть также использованы для нахождения характеристик раздела разнородных металлов.

Полученные в работе данные по зависимостям поверхностного натяжения от состава и размерного фактора, соответственно для плоских и искривленных границ раздела конденсированных фаз для бинарных металлических систем могут использоваться при решении прикладных задач в области материаловедения при получении и модификации сплавов и композитов с заранее заданными свойствами.

Полученные в работе данные по составам объемных фаз и межфазного слоя с учетом размерных зависимостей можно использовать в качестве входных данных для расчета наноразмерных фазовых диаграмм состояния двойных металлических систем.

Степень достоверности полученных результатов в диссертационной работе Афашагова А.А. достигается использованием аппарата термодинамики поверхностных и межфазных явлений Гиббса-Гуггенгейма-Русанова. Все полученные новые соотношения в работе исследованы на предельные случаи, в результате чего они в частных случаях совпадают с известными формулами и уравнениями классической термодинамики. Наблюдается совпадение построенных в работе фазовых диаграмм с экспериментальными диаграммами состояния двойных металлических систем.

Замечания по диссертации

1. При получении уравнения для размерной зависимости межфазного натяжения наночастицы в матрице в бинарной системе автор применяет к наночастице понятие термодинамической фазы и фазового перехода. Насколько это правомерно при рассмотрении таких малых объектов и где

границы применимости?

2. При расчетах размерной зависимости межфазного натяжения наночастицы в матрице, выполненные по уравнению (3.1.20) в диссертации, проводилось ли сравнение с существующими экспериментальными данными? Если нет, то насколько корректны ваши расчеты?

3. При рассмотрении искривленной поверхности раздела конденсированных фаз нет ясности по размерной зависимости скачков энтропии и объема при фазовых переходах, которые влияют на изменения температуры фазового перехода в зависимости от степени диспергирования фазы в матрице. Прокомментируйте этот момент.

4. В работе принимаются некоторые сокращения, которые расшифровываются в начале диссертации. Однако в дальнейшем, не все они используются по ходу текста. Так, сокращение для коэффициента активности (КА) и для термодинамического метода (ТМ) в работе не используются, хотя и были приняты автором.

Сделанные замечания не снижают общего положительного впечатления о представленной диссертационной работе и не уменьшают ее ценность. Автореферат, а также опубликованные работы по теме диссертации отражают в полном объеме ее содержание.

Заключение

Диссертационная работа Афашагова А.А. «Термодинамические свойства плоской и искривленной границы раздела конденсированных фаз в бинарных металлических системах» является законченной научно-квалификационной работой. Она выполнена на достаточно актуальную тему, обладает научной новизной и практической ценностью. Все результаты, полученные соискателем достоверны, а выводы обоснованы.

Диссертационная работа «Термодинамические свойства плоской и искривленной границы раздела конденсированных фаз в бинарных металлических системах» отвечает требованиям Положения о порядке

присуждения ученых степеней, соответствует паспорту специальности 1.3.8.– Физика конденсированного состояния (пункты 1, 2) по физико-математическим наукам, а ее автор, Афашагов Анзор Артурович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент

Кутуев Руслан Азаевич



доктор физико-математических наук, доцент,
проректор по общим вопросам, профессор кафедры общей физики
ФГБОУ ВО «Чеченский государственный университет им. А.А. Кадырова»

Шифр и наименование специальности, по которой официальный оппонент защитил диссертацию: 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

Адрес: 364024, Чеченская республика, г. Грозный,
Ахматовский р-он, ул. А. Шерипова, 32
Тел.: +7 (964) 074 45 46
E-mail: kra-07@mail.ru

Подпись Кутуева Р.А. удостоверяю:

Ученый секретарь Ученого Совета
ФГБОУ ВО «ЧГУ им. А. А. Кадырова»



Абдулазимов С.С. /Ф.И.О./

« 02 » _____ 2024г.