

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

диссертационного совета Д 212.141.17 на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана» Министерства образования и науки Российской Федерации по диссертации на соискание ученой степени кандидата наук

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 25 мая 2016 г. № 12

О присуждении Хмелевскому Николаю Олеговичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Аннигиляция позитронов в сплавах железа» по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния принята к защите 02 марта 2016 года, протокол № 4 диссертационным советом Д 212.141.17 на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана» Министерства образования и науки Российской Федерации, 105005, г. Москва, ул. 2-ая Бауманская, 5, приказ № 105/нк от 11.04.2012 г.

Соискатель Хмелевский Николай Олегович 1976 года рождения.

В 1999 году соискатель окончил Московский физико-технический институт (государственный университет), присуждена квалификация инженер-физик по специальности «Прикладные математика и физика». С 2005 по 2009 годы соискатель обучался в аспирантуре по заочной форме обучения по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния в федеральном государственном унитарном предприятии (в настоящее время – федеральном государственном бюджетном учреждении) «Государственный Научный Центр Российской Федерации - Институт Теоретической и Экспериментальной Физики» (ФГБУ «ГНЦ РФ ИТЭФ»), работает в ФГБУ «ГНЦ РФ ИТЭФ» Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» в должности инженера-физика в лаборатории № 322.

Диссертация выполнена в лаборатории № 322 ФГБУ «ГНЦ РФ ИТЭФ» Национального исследовательского центра «Курчатовский институт».

Научный руководитель – кандидат технических наук Графутин Виктор Иванович, заведующий лабораторией № 322 ФГБУ «ГНЦ РФ ИТЭФ».

Официальные оппоненты:

Степанов Владимир Александрович, доктор физико-математических наук, Обнинский институт атомной энергетики – филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», кафедра материаловедения, заведующий кафедрой,

Калашев Олег Евгеньевич, кандидат физико-математических наук, федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт ядерных исследований Российской академии наук», теоретический отдел, старший научный сотрудник

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация - Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической физики им. Н.Н. Семенова Российской академии наук, Москва, в своем положительном заключении, подписанном доктором физико-математических наук, профессором Шантаровичем Виктором Петровичем и профессором, председателем Ученого совета ОСВ ИХФ РАН Крупянским Юрием Федоровичем, утвержденном директором института, академиком Берлиным Александром Александровичем, указала, что диссертационная работа Хмелевского Н.О. «Аннигиляция позитронов в сплавах железа» удовлетворяет требованиям постановления Правительства Российской Федерации о порядке присуждения ученых степеней от 24.09.2013 № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Актуальность темы диссертационной работы обусловлена большими практическими возможностями исследуемых в работе материалов. Научная новизна работы, по мнению ведущей организации, определяется оценкой величины и выяснением направления переноса заряда при кристаллизации аморфных металлических сплавов системы FeCrV и FeCuNbSiV. Хмелевским Н.О. проведены исследования угловой корреляции аннигиляционных гамма-квантов на линейках материалов с различной степенью кристаллизации, что позволяет по-новому взглянуть на причины, вызывающие эти процессы и определяющие изменение свойств при кристаллизации. Такие измерения на этом классе материалов проведены впервые. Отмечено, что результаты работы могут быть использованы и получить дальнейшее развитие в работе таких организаций как ВНИИНМ им. Ак. А.А. Бочвара, НИКИЭТ им. Н.А. Доллежала, НИЦ «Курчатовский институт», ИМЕТ им. А.А. Байкова, НИТУ «МИСиС».

Соискатель имеет 27 опубликованных работ, в том числе по теме диссер-

тации 8 работ общим объемом 2.85 печатных листа, из которых на долю соискателя приходится 0,885 печатных листа, опубликованных в рецензируемых научных изданиях 7, все они входят в международные реферативные базы данных и системы цитирования, в том числе Scopus. Требования п.п. 11 и 13 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, предъявляемые к публикации основных научных результатов диссертации, выполняются. Требования, установленные п. 14 действующего Положения о присуждении ученых степеней, соблюдаются. Сведения об опубликованных работах, в которых изложены основные научные результаты диссертации, достоверны.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Графутин В.И., Фунтиков Ю.В., Хмелевский Н.О. Электронные свойства аморфного сплава FeCuNbSiB // Физика твердого тела. 2012. Т. 54, № 1. С. 29–31.
2. Графутин В.И., Фунтиков Ю.В., Хмелевский Н.О. Позитронная спектроскопия металлов группы железа // Химия высоких энергий. 2012. Т. 46, № 1. С. 76.
3. Изменение электронных свойств в аморфных сплавах на основе железа при их кристаллизации / Ю.В. Фунтиков, О.В. Прокопьев, Н.О. Хмелевский, О.В. Илюхина, В.С. Хмелевская, К.А. Горчаков, В.И. Графутин // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2010. № 7. С. 80–84.
4. Графутин В.И., Прокопьев Е.П., Фунтиков Ю.В., Хмелевский Н.О., Дубов Л.Ю., Хтут М.З., Штоцкий Ю.В. Позитронная диагностика азотистых сталей // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2013. № 6. С. 76–79.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы от: **Федорова С.В.**, кандидата технических наук, доцента кафедры высокоэффективных технологий обработки ФГБОУ ВО «Московский государственный технологический университет «Станкин»; **Шелепина А.Л.**, доктора физико-математических наук, профессора кафедры высшей математики ФГБОУ ВО «Московский технологический университет» (МИРЭА); **Кораблевой С.А.**, кандидата технических наук, начальника лаборатории отдела прочности ФБУ «Научно-технический центр по ядерной и радиационной безопасности»; **Штоцкого Ю.В.**, кандидата физико-математических наук, тьютора кафедры медицинской физики ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ»; **Черно-**

ва В.М., доктора физико-математических наук, профессора, главного научного сотрудника АО «Высокотехнологический научно-исследовательский институт неорганических материалов имени академика А.А. Бочвара»; **Базалеевой К.О.**, кандидата физико-математических наук, доцента кафедры материаловедения ФГБОУ ВПО «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана»; **Громова В.Е.**, доктора физико-математических наук, профессора, заведующего кафедрой физики имени проф. В.М. Финкеля, и **Коваленко В.В.**, доктора физико-математических наук, доцента, профессора кафедры физики имени проф. В.М. Финкеля ФГБОУ ВПО «Сибирский государственный индустриальный университет»; **Трушниковой А.С.**, кандидата технических наук, научного сотрудника ОАО «Композит».

Все отзывы положительные. В качестве замечаний отмечено, что: было бы интересно выявить возможную корреляцию между спектрами угловых распределений аннигиляционных фотонов и функциями радиального распределения атомов, в автореферате присутствуют некоторые стилистические неточности, затрудняющие его чтение (Федоров С.В.); в одной работе соединены разноплановые материалы – аморфные металлические сплавы и облученные стали (Кораблева С.А, Базалеева К.О.); не всегда прослежена связь между параметрами спектров позитронной аннигиляционной спектроскопии и структурой материалов (Базалеева К.О.); в тексте активно используются специфические термины, понятные только узким специалистам, необходимо было дополнительно пояснить некоторые определения-выводы (Чернов В.М.); не проанализированы особенности зоны проводимости металлических стекол (Штоцкий Ю.В.), не все приведенные в диссертации экспериментальные данные, полученные разными методами, использованы при формировании выводов (Трушников А.С.).

В отзывах сделан вывод о том, что диссертационная работа Хмелевского Николая Олеговича отвечает требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 –Физика конденсированного состояния.

Выбор официальных оппонентов обоснован тем, что официальные оппоненты являются компетентными учеными в области физики конденсированного состояния (материаловедения, взаимодействия излучения с веществом – Степанов В.А., теоретические и расчетные исследования взаимодействия энергии с веществом – Калашев О.Е.).

Выбор ведущей организации обоснован тем, что федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химической физики им. Н.Н. Семенова РАН известно своими исследованиями в области радиационной химии, в том числе в нем проводились активные исследования использованным в диссертационной работе методом – методом позитронной аннигиляционной спектроскопии.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана новая экспериментальная методика выделения вклада d -электронов в угловом распределении аннигиляционных гамма-квантов, позволившая выявить качественно новые закономерности явления кристаллизации аморфных металлических сплавов на основе железа. Полученная методика позволяет расширить применимость метода углового распределения аннигиляционных фотонов на широкий круг материалов. Разработанный подход апробирован на эталонных образцах переходных металлов, показана его адекватность поставленной задаче. С использованием предложенного метода проведены исследования процесса перестройки электронной подсистемы аморфных металлических сплавов систем $\text{FeCr}_{18}\text{B}_{15}$, $\text{FeCu}_1\text{Nb}_3\text{Si}_{13.5}\text{B}_9$ при кристаллизации при термическом отжиге и при облучении ионами аргона. Показано существенное различие в форме импульсного распределения электронов валентной зоны, коррелирующее с существенными изменениями термоэлектродвижущей силы;

предложен новый подход к интерпретации результатов эксперимента позитронной аннигиляционной спектроскопии, который позволил получить качественно новые результаты;

доказано, что при кристаллизации под воздействием термического отжига и облучения происходит перераспределение электронной плотности между d -оболочкой атома железа в металлических стеклах обеих систем и валентной зоной. Данный факт подтвержден независимыми измерениями методами углового распределения аннигиляционных гамма-квантов и рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии, находящимися в согласии между собой;

введены измененные трактовки понятий, используемых при интерпретации углового позитронного эксперимента.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что: **доказано** перераспределение эффективного заряда электронных оболочек атома железа при кристаллизации аморфных сплавов;

применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, т.е. с получением обладающих новизной результатов) использованы результаты расчетов электронной плотности методами теории функционала плотности в приближениях локальной и взвешенной плотностей, проведено их сравнение с экспериментом, внесено уточнение в эмпирические формулы; **изложены** условия перераспределения заряда в металлических стеклах, определены пороговые температуры для активации процесса; **раскрыты** особенности формирования медных преципитатов в матрице железа на ранней стадии развития; **изучено** образование медных преципитатов в облученных аморфных сплавах $\text{FeCu}_1\text{Nb}_3\text{Si}_{13.5}\text{B}_9$ и образцах сталей сварного шва корпуса реактора ВВЭР 440 проекта 230 Св-10ХМФТ с различным содержанием фосфора в процессе пострadiационного отжига. Прослежен механизм формирования медных преципитатов. Показано, что образование зародыша происходит путем конденсации вокруг вакансионного дефекта; **проведена модернизация** представлений об эффективном заряде атома никеля и меди, используемых в расчетах электронной плотности методами функционала плотности.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

разработан и рекомендован новый метод исследования эффективного заряда переходных металлов, проведена его апробация на эталонных образцах. Метод был успешно применен для исследования перераспределения электронной плотности аморфных металлических сплавов на основе железа; **определено** состояние дефектной структуры образцов-наблюдателей материалов сварного шва реактора ВВЭР 440/230 после пострadiационного отжига в режимах, соответствующих реальному режиму отжига корпуса реактора; **создана** методика исследования медных преципитатов в матрице железа; **представлены** методические рекомендации по оптимизации экспериментов позитронной аннигиляционной спектроскопии (оптимальное распределение экспериментальных точек, определение минимально необходимой статистической значимости исходных данных).

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

результаты были получены на апробированном оборудовании, их достоверность подтверждена калибровкой на эталонных образцах. Показано, что ре-

зультаты воспроизводятся при проведении независимых измерений различными методами;

теория согласуется с опубликованными экспериментальными данными;

идеи базируются на обобщении широкого спектра литературных данных;

использовано сравнение полученных данных и литературных данных по расчетам электронной плотности, экспериментальных данных других авторов;

установлено количественное совпадение полученных в работе результатов с независимыми расчетными работами по данной тематике [Nagai Y., Puska M.J., Nieminen R.M., Rubaszek A.P., Asoka-Kumar, Kuriplach J., Melikhova O., Domain C.Z., Szotek W., Ghosh V.J., Alatalo M., Temmerman M. et. al.];

использованы современные методы обработки полученных экспериментальных данных. Проведен анализ их статистической значимости.

Личный вклад соискателя состоит в: подготовке и планировании эксперимента; участии в переводе установки измерения углового распределения аннигиляционных фотонов на управление современным компьютером; участии в отладке и калибровке установки измерения времени жизни позитрона в среде; обработке и интерпретации, в том числе с использованием разработанных соискателем методик, результатов эксперимента; написании статей в научные журналы; подготовке образцов, проведении измерений и обработке результатов эксперимента методом рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии; анализе и обобщении результатов, полученных различными методами.

Диссертационная работа соответствует пункту 1 паспорта научной специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертационная работа Хмелевского Николая Олеговича «Аннигиляция позитронов в сплавах железа» соответствует критериям, установленным п.п. 9 и 10 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. Она является самостоятельной завершенной научно-квалификационной работой, в которой содержится решение важной для физики конденсированного состояния научной задачи, связанной с определением состояния электронной и дефектной системы аморфных металлических сплавов в процессе кристаллизации и определением состояния дефектной структуры образцов сталей сварного шва корпуса реактора ВВЭР 440 проекта 230 Св-10ХМФТ.

На заседании 25 мая 2016 года диссертационный совет Д 212.141.17 принял решение присудить Хмелевскому Николаю Олеговичу ученую степень

кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 16 докторов наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в состав совета, (дополнительно введены на разовую защиту 0 человек), проголосовали: за 17, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель

диссертационного совета  Коржавый Алексей Пантелеевич

Ученый секретарь

диссертационного совета  Лоскутов Сергей Александрович

Дата оформления заключения

25 мая 2016 года