

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

Роженко Наталії Миколаївни

«Використання методу регуляризації для визначення характеристик субструктури кристалічних матеріалів за формою дифракційних кривих»,
поданої на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук
за спеціальністю 01.04.07 – «фізика твердого тіла»

Актуальність теми дисертації

Одним з визначних факторів впливу на механічні та різні функціональні властивості має характер структури та її дефектність. На сьогодні наявна ціла низка методів, що дозволяють досліджувати ці особливості внутрішньої будови, проте деякі з них або вимагають досить дорогого обладнання, або є руйнівними, оскільки для досліджень вимагають спеціальних методів виготовлення зразків. В цьому відношенні метод дифракції рентгенівських променів має відповідні переваги, оскільки обладнання для таких досліджень є відносно не дорогим, доступним та досить простим в експлуатації, а сам метод є практично не руйнівним і дозволяє виявляти елементи субструктури в широкому розмірному діапазоні. На сьогодні існує ціла низка методів, що дозволяють за допомогою профільного аналізу дифракційних максимумів встановлювати низку параметрів: розмір блоків когерентного розсіювання, мікродеформації, густину дефектів пакування, густину дислокацій тощо. Проте, досить часто різні методи, розроблені для визначення таких параметрів можуть призводити до різних за величиною характеристик.

Особисто мені самому приходилось зустрічатися з такими прикладами. Так, проведені мною модельні розрахунки для структур із заданими рівнями мікродеформацій та розміром блоків когерентного розсіювання показали, що метод апроксимації та метод Фур'є аналізу призводить до різної оцінки величин, причому, у методі Фур'є аналізу одержані характеристики відрізнялися від модельних і сильно залежали від величини заданих вихідних параметрів. Іншим прикладом, з яким мені прийшлося зустрітися, це розділення дублету методом Фур'є аналізу. Реалізація відповідного алгоритму показала, що даний метод прекрасно розділяє дублети при широких дифракційних максимумах, або при їх великому розщепленні (при великих кутах), що стосується дублетів з малою

шириною дифракційних максимумів (еталон) при малих кутах, то при розділенні виникало спотворення виділеного синглету.

Нажаль, мною було припинено вияснення причин виявлених особливостей, але, як показало рецензування представленої роботи, основним в цьому випадку є необхідність розвитку нових підходів до проведення рентгенівського експерименту, зокрема, до цифрової обробки його результатів із застосуванням сучасних стійких математичних методів. Слід сказати, що відповідні методи відомі і застосовуються, наприклад, в астрономії, де використання спеціальних методів обробки з використанням Фур'є аналізу постає можливість виділяти незначні спотворення сигналу при проходженні екзопланет через диски зірок. Однак методи відомі в астрономії та й в інших областях науки досить мало використовуються для вирішення задач матеріалознавства, в тому числі і задач дифракційного аналізу.

Отже сказане вище цілком обґрунтовує **актуальність** даної роботи.

Загальна характеристика дисертаційної роботи

Дисертаційна робота складається зі вступу, трьох розділів, загальних висновків і переліку використаних джерел із 116 найменувань. Повний обсяг дисертації 175 сторінок складає друкованого тексту.

У **вступі** розкрито суть і стан наукової задачі, обґрунтовано актуальність роботи, сформульовано головну мету, задачі та методи досліджень, вказано на зв'язок з науковими програмами, визначено новизну отриманих результатів та обґрунтовано їхню практичну цінність. У **вступі** також висвітлено особистий внесок здобувача, наведено відомості про апробацію результатів роботи та кількість публікацій за матеріалами дослідження.

У **першому розділі** проведено огляд математичних моделей, на яких базуються традиційні підходи дослідження дефектного стану методом рентгенографії, а також сучасних стійких математичних методів, які можуть бути використані для досягнення мети дослідження. Представлено основні поняття, означення та підходи, досліджено умови та особливості застосування найбільш уживаних методів. Аналіз літературних даних дозволив автору визначити

напрямки та основні завдання дисертаційної роботи.

У **другому розділі** представлено розроблену автором методику аналізу дефектного стану матеріалів як послідовність етапів цифрової обробки рентгенівських дифрактограм. Ключовим етапом методики, який полягає в усуненні інструментального уширення із застосуванням стійкого методу регуляризації, є відновлення фізичних дифракційних ліній досліджуваного об'єкта. Наявність фізичних дифракційних ліній, одержаних на цьому етапі, відкриває широкі можливості для аналізу субструктури об'єктів дослідження. Ці можливості автором було використано для побудови узагальненої методики розділення ефектів дифракції рентгенівський променів на ґратці з мікродеформаціями та ОКР, а також для встановлення закону розподілу мікродеформацій у досліджуваному зразку. Слід зазначити вдалий вибір об'єктів для тестування розробленої методики, якими є XRD-дифрактограми від порошку W. Пружна ізотропія вольфраму дозволяє проводити аналіз тонкої структури одразу за всією сукупністю рефлексів його рентгенограми, що полегшує перевірку вірогідності одержаних числових оцінок та їх аналіз на основі сучасних знань в області фізики твердого тіла.

У **третьому розділі** із застосуванням розробленої методики проведено дослідження дефектного стану порошоків W, WC і Fe після розмелу різної тривалості, визначено такі характеристики тонкої структури, як середні значення мікродеформацій і розмірів ОКР, їхню залежність від тривалості розмелу, а також закони розподілу мікродеформацій у порошках W та WC. Проведено порівняння результатів застосування розробленої методики із розрахунками за традиційними методами. Достовірність побудованих функцій щільності розподілу мікродеформацій досліджуваних об'єктів підтверджено збігом модельних і експериментальних дифракційних ліній.

Наукова новизна отриманих результатів полягає в наступному:

- вперше розроблено й застосовано узагальнення методів моментів та Холла-Вільямсона для розділення ефектів дифракції рентгенівський променів на ґратці з мікродеформаціями та ОКР, яке не потребує апріорних припущень щодо закону розподілу мікродеформацій і враховує характер функції

розсіяння через наявність ОКР;

- вперше розроблено, обґрунтовано й застосовано процедуру побудови щільності розподілу мікродеформацій, яка базується на аналізі форми відновленого повного фізичного профілю і не потребує переходу до простору об'єкта.

Наукове та практичне значення одержаних результатів полягає в наступному:

- розроблений науково-методичний апарат для визначення характеристик субструктури кристалічних матеріалів розширює область застосування рентгенографічного методу для дослідження дефектного стану матеріалів, дифракційні криві яких сумірні за шириною з еталонними;
- запропонована процедура розділення ефектів дифракції рентгенівських променів на гратці з мікродеформаціями та ОКР зберігає простоту графічного методу аналізу інтегральної ширини і має вищу точність за рахунок усунення похибок, які при традиційних підходах виникають внаслідок жорсткості апріорних припущень щодо закону розподілу мікродеформацій;
- одержаний підхід забезпечує встановлення кривих щільностей розподілу мікродеформацій, що відкриває нові можливості при дослідженні поля неоднорідних пружних деформацій у продуктах розмелу, їх залежності від умов розмелу та впливу на експлуатаційні властивості матеріалів.

Повнота відображення в опублікованих роботах наукових положень, висновків та результатів

Основні результати дисертаційної роботи та сформульовані в ній висновки висвітлені у 11-ти статтях з них 5 у фахових виданнях (у тому числі 2 статті у виданнях, які включені до міжнародних наукометричних баз даних), 1 стаття у міжнародному виданні іноземної держави (США) та в матеріалах ряду наукових конференцій. Публікації за темою дисертації в повній мірі відображають наукові результати роботи.

Зауваження до змісту та тексту дисертації та автореферату.

Незважаючи на сукупність оригінальних і важливих результатів до роботи є

ряд зауважень і побажань.

1. Розвинута проблематика наукових досліджень направлена на розробку нового підходу до обробки експериментальних результатів, тобто передбачає використання їх, перш за все, фізиками-експериментаторами. Проте, матеріал, викладений в роботі, досить сильно "математизований" з використанням системи позначень, що більш зрозуміла науковцям, що займаються теорією. Це досить ускладнює його сприйняття фізиками-експериментаторами, що безпосередньо займаються експериментальними дослідженнями та обробкою результатів. Ця обставина може досить сильно обмежити розповсюдженість даного методу.
2. Порівняння результатів аналізу дифракційних максимумів з використанням методу регуляризації узгоджується з результатами аналізу методу апроксимації та Фур'є аналізу. Проте, це аж ніяк не може свідчити, що метод регуляризації дає краще наближення. Таке твердження можна отримати на основі порівняння з результатами, що одержані іншими методами, наприклад, електронною мікроскопією, або шляхом обробки різними методами "модельних" дифрактограм із наперед заданими розмірами блоків та мікрореформаціями.
3. В тексті та на рисунках (див. стор.74 та рис.2.4 і далі) не зовсім коректним виглядає ряд тверджень, що стосується методу апроксимації. Наприклад, згортка визначена методом апроксимації, Фур'є коефіцієнти в методі апроксимації тощо. В методі апроксимації, що і відмічено в роботі, задається конкретна функція, а представлений результат – є відповідні функції або її Фур'є розклад після виділення інструментального уширення.
4. Результати аналізу експериментальних дифракційних профілів в роботі проведені з використанням лише програмного пакету New_profile. Бажано було б провести відповідний аналіз з використанням інших подібних програм або з використанням оригінального програмного забезпечення. Оскільки New_profile не завжди доступний до використання і, крім цього, це було б додатковим аргументом універсальності розвинутого підходу та підвищувало б достовірність одержаних результатів.

5. В тексті наведено низку графіків про залежність коефіцієнтів Фур'є від його номеру n , одержаних при Фур'є-аналізі експериментальних профілів. Добре відомо, така залежність має монотонний, спадний характер лише для коефіцієнтів з малими номерами. Це і оговорено в роботі, проте наведені графіки в роботі мають монотонну залежність для n що перевищує 100 і більше. Нажаль цей фактор не оговорено в роботі і є не зрозумілим.
6. З огляду на те, що особливу увагу в дослідженні приділено методиці встановленню законів розподілу мікродеформацій у зразках, було б доцільно навести приклади впливу кривих розподілу на макрохарактеристики матеріалу та порівняти ці розподіли з відомою анізотропією пружних властивостей.
7. Є технічні зауваження до тексту автореферату, як то: «ступеню» (стор. 12), «із XRD-дифрактограмами» (стор. 20), позначення функції тангенс як \tan , а не загальноприйнятим tg тощо.

Висловлені зауваження не знижують загальну високу позитивну оцінку дисертаційної роботи і не применшують її вкладу у фізику твердого тіла та матеріалознавство.

На основі викладеного вважаю, що дисертаційна робота **Роженко Наталії Миколаївни «Використання методу регуляризації для визначення характеристик субструктури кристалічних матеріалів за формою дифракційних кривих»** відповідає вимогам «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженому Постановою Кабінету Міністрів України від 24 липня 2013 року № 569 зі змінами, затвердженими Постановами Кабінету Міністрів України № 656 від 19 серпня 2015 року та № 1159 від 30 грудня 2015 року, а її автор заслуговує на присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 - фізика твердого тіла.

Доктор фіз.-мат. наук, професор,
професор кафедри фізики металів
фізичного факультету Київського
національного університету
імені Тараса Шевченка



Підпис
ВЧЕРНІЙ С. П.
КАРАУЛ
31.10.2019