

ОТЗЫВ

председателя диссертационного совета на диссертацию Панченко Артёма Юрьевича на тему: «Устойчивость и тепловые эффекты в кристаллических материалах при больших деформациях», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела

Актуальность темы диссертации. Материалы с кристаллической структурой имеют широкий спектр применения в технике от деталей конструкций до микроэлементов различных приборов и устройств. Работоспособность таких материалов, их прочностные и физико-механические свойства, во многом зависят от особенностей структуры кристалла, ее способности сохранять энергетически выгодное устойчивое состояние или переходить в другое под действием внешних возмущений. Перестройка кристаллической структуры является одной из причин образования микродефектов, накопление и развитие которых снижает прочность материала и, в конечном счете, может привести к разрушению. Поэтому тема диссертации, направленная на исследование методами молекулярной динамики и механики сплошной среды термомеханических свойств идеальных кристаллических структур, областей устойчивого состояния внутренней структуры кристаллов при конечных деформациях, сопоставление полученные области устойчивости с известными результатами аналитических расчетов, а также исследование двухфазных состояний материала после потери устойчивости, несомненно, актуальна.

Новизна полученных результатов. Наиболее значительными новыми результатами диссертации являются:

Методом молекулярной динамики определены и исследованы области устойчивости треугольной кристаллической решетки в пространстве конечных деформаций при парном силовом взаимодействии. Показано, что области устойчивости решетки соответствуют областям сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды. Исследована микроструктура неоднородных состояний рассмотренной модели после потери устойчивости треугольной решетки, в том числе, при структурном переходе из треугольной в квадратную решетку. Установлены механизмы релаксации энергии при структурном переходе. Получены уточненные коэффициенты тензорного уравнения состояния Ми-Грюнайзена. Выяснена их зависимость от параметров моделирования, температуры и деформаций в устойчивых точках пространства конечных деформаций. Определена область применимости этого уравнения.

Достоверность полученных результатов и выводов обусловлена использованием апробированных методик компьютерного моделирования, сравнением с результатами, полученными аналитически для случаев, допускающих аналитическое исследование, качественным и количественным совпадением с результатами теоретических исследований других авторов. В частности, показано совпадение полученных в работе областей устойчивости идеальной кристаллической решетки при парном силовом взаимодействии с известными областями сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентного континуума, найденными аналитически. Достоверность результатов подтверждается также сравнением выявленных двухфазных состояний, формирующихся после потери устойчивости, с оценками теории фазовых переходов и функции Грюнайзена, полученной из макропараметров атомарной системы, с соответствующей аналитической оценкой в широком интервале изменения температуры и напряженно-деформированных состояний.

Ценность для науки и практики. Результаты, полученные в работе методом молекулярной динамики, показали его эффективность при определении механических свойств кристаллических материалов, подтвердили применимость аналитических методов

1
N 09/2-294 от 12.12.2018

при определении границ устойчивого состояния кристаллической решетки при парном силовом взаимодействии. С теоретической точки зрения результаты диссертации вносят значительный вклад в механику кристаллических материалов, а проведенные в работе исследования открывают перспективы для распространения предложенных подходов на другие типы задач. Результаты данной работы могут быть использованы для идентификации параметров аналитических моделей в рамках континуальной механики, а также в пакетах прикладных программ, включающих в себя сочетание подходов континуальной и дискретной механики. Метод исследования устойчивости микроструктуры материалов путем компьютерного моделирования может быть применен для прогнозирования работоспособности элементов конструкций, для повышения достоверности расчетов по определению надежности конструкции при больших деформациях и для определения предельных нагрузок, диктуемых структурными превращениями, в том числе связанными с переходом в другое равновесное состояние. Это позволит уменьшить вес элементов конструкций и получить оптимальное соотношение между прочностью и жесткостью изделий, что, в свою очередь, приведет к снижению стоимости промышленных объектов.

Работа объемом 105 страниц состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы из 122 наименований и 55 рисунков.

В первой главе представлен аналитический обзор методов исследования устойчивости и описания термомеханических процессов в конденсированных средах, на которые опираются исследования второй и третьей глав диссертации. Приведены выражения эквивалентных термомеханических характеристик через микропараметры дискретной системы, обсуждаются методы записи уравнений состояния и аналитических условий сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентного континуума. Описан вывод условий сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентного континуума для идеальных двумерных и трехмерных структур. Представлены асимптотически точные выражения для вычисления тензора напряжений Коши и внутренней энергии при наличии теплового движения, необходимые для исследования термодинамических параметров кристаллических структур методом молекулярной динамики.

В второй главе проводится исследование устойчивости простых кристаллических решеток. Приведено описание моделируемой системы и результаты расчетов, позволившие установить основные характеристики ненапряженного и напряженного состояния решетки. Приводится алгоритм определения устойчивости кристаллической решетки методом молекулярной динамики. Получены области устойчивости, соответствующие областям сильной эллиптичности уравнений равновесия эквивалентной сплошной среды при взаимодействии частиц, определяемом потенциалом Морзе. Исследовано влияние параметра, отвечающего за ширину потенциальной ямы на вид областей устойчивости треугольной и квадратной решетки. Изучено поведение тензора жесткости и упругих характеристик кристаллической решетки в пространстве конечных деформаций. Исследовано поведение кристалла после потери устойчивости и переход к двухфазной структуре материала. Построены и исследованы области устойчивости ГЦК решетки в пространстве деформаций, выяснен их физический смысл.

В третьей главе методом молекулярной динамики исследуются тензорные свойства уравнения состояния Ми-Грюнайзена в случае двумерной кристаллической структуры. Аналитически показано, что тензорная функция Грюнайзена существенно зависит от соотношения собственных чисел тензора деформационной температуры, который в данной работе определяется численно. Исследовано влияние параметров моделирования на отношении диагональных компонент усредненного тензора деформационной температуры для трех потенциалов взаимодействия. Показана необходимость использования уравнения состояния Ми-Грюнайзена в тензорном виде. Проведено сравнение детерминированной и стохастической задач определения корреляций перемещений частиц в идеальной решетке..

Замечания по работе.

1. Работа содержит большой и интересный объем информации о результатах исследования поведения и перестройки кристаллической структуры методом молекулярной динамики, однако в ряде случаев способы получения этой информации требуют более подробного изложения. В связи с этим возникает ряд вопросов:

- На рис. 2 приводятся точные и приближенные зависимости расстояния R от номера координационной сферы, а на рис. 3, 4 от количества учитываемых координационных сфер без пояснений, как получены точные зависимости и как найдены соответствующие аппроксимации (51) – (60).
- Трудно понять, что представляет собой содержание первого абзаца п. 2.8 на стр. 52 – общие положения или положения, вытекающие из результатов моделирования автора.
- На стр. 58 не определен вектор \mathbf{V}_n , и, кроме того, неясно, на чем основывается выбор формулы (67).
- Отсутствует комментарий к графику (29), который построен, по-видимому, по формуле (67).
- На стр. 62 сказано, что «результаты численного эксперимента полностью соответствуют теоретическим». Здесь следовало бы дать ссылку или пояснить.
- В отличие от глубины потенциальной ямы D , ширина потенциальной ямы не определена.

2. Хотя работа написана достаточно ясным и хорошим литературным языком, в тексте содержится довольно много опечаток. Также имеются опечатки в первых равенствах формул (23) и (24). Кроме того, порой возникают трудности при ее чтении, связанные с тем, что в некоторых случаях определение введенных величин появляется в тексте намного позже их самих. Например, на стр. 16 введены величины a_k и A_k , которые определены только на стр. 19, параметр T_0 , введенный на стр. 37, определен на стр. 41.

Указанные замечания не умаляют значимости полученных результатов и не снижают общей положительной оценки работы.

Диссертация Панченко Артёма Юрьевича на тему: «Устойчивость и тепловые эффекты в кристаллических материалах при больших деформациях» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 01.09.2016 № 6821/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Панченко Артём Юрьевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела. Пункт 11 указанного Порядка диссертантом не нарушен.

Председатель диссертационного совета
Доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры вычислительных методов
механики деформируемого тела факультета
прикладной математики – процессов управления СПбГУ

Греков Михаил Александрович.

05.12.2018

3