

ОТЗЫВ

члена 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

Диссертация Панченко А.В. посвящена исследованию устойчивости кристаллической структуры с учетом температурных колебаний атомов при больших деформациях монокристаллов.

Это исследование является важным, так как оно позволяет предсказывать поведение любых кристаллических веществ (монокристаллов, как частного случая) при различных термомеханических воздействиях. Устойчивость структуры, как правило, означает неизменность физико-механических свойств. Структурные переходы при больших деформациях могут приводить, как к возникновению дополнительных полезных свойств, так и к быстрому разрушению материалов под нагрузкой. Все эти особенности важно знать на этапе проектирования материалов, которое сейчас делается с применением предсказательного математического моделирования. Такое моделирование позволяет существенно сократить длительность и стоимость разработки и внедрения новых материалов и обеспечить им желаемые экстремальные свойства. Поэтому, актуальность и практическая значимость выбранной соискателем темы исследования, а также результатов работы не вызывает сомнений.

Соискателем впервые построены области устойчивости треугольной и квадратной плоских кристаллических решеток в при конечных деформациях. Исследованы возможные микроструктурные переходы из треугольной решетки в квадратную, получена зависимость коэффициентов тензорного уравнения состояния Ми-Грюзена от температуры и деформаций. Эти положения вынесены на защиту.

Достоверность результатов определяется использованием известных моделей, аналитических и численных методов и подходов наряду с уравнениями метода динамики частиц. Для дополнительного подтверждения полученные соискателем результаты сравниваются с экспериментальными данными. Теоретическая значимость работы состоит в разработке новых методов анализа структуры и прочности материалов на основании метода динамики частиц. Имеется также фундаментальное сопоставление физических и механических характеристик, позволяющее уточнить модели элементарного попарного взаимодействия атомов кристаллической решетки. Механические свойства сплошной среды получены в работе, как длинноволновое приближение при исследовании поведения ансамбля частиц с заданными парными физическими взаимодействиями.

Работа состоит из введения трех глав, заключения и списка литературы. Текст работы представлен на русском и английском языках.

Во введении дается обоснование актуальности темы, формулируются общие цели исследования. Также, во введении дана характеристика диссертации обоснована достоверность выводов, сформулированы положения, выносимые на защиту, приведена

№ 09/2-272 от 04.12.2018

характеристика проделанной Панченко А.В. работы, с указанием публикаций по теме диссертации и различных аппробаций результатов.

В первой главе дан обзор литературы о связи микро и макромеханических параметров твердого тела. Представлены: использованный соискателем потенциал парного взаимодействия частиц, основные соотношения между напряжениями, кинетической и потенциальной энергией сплошной среды, кинетической и потенциальной энергией составляющих ее частиц, полученные другими авторами.

Во второй главе дан обзор литературы, посвященной устойчивости простых кристаллических решеток, выбран метод молекулярной динамики для дальнейших исследований и сформулированы критерии устойчивости треугольной и квадратной решеток плоских при конечных деформациях.

Построены области устойчивости решеток в плоскости главных деформаций, рассмотрены основные варианты перехода от треугольной к квадратной решетке. Компоненты тензора жесткости определялись методом возмущений. Рассмотрена релаксация решетки после потери устойчивости, оценено время такой релаксации. Для более адекватного моделирования релаксационных процессов предложено ввести в модель диссиацию, подобраны диссиативные коэффициенты. Проведено сопоставление с экспериментальными данными. Результат обобщен на трехмерные кристаллические решетки. Проведена физическая интерпретация полученных результатов, в частности, - отрицательных эффективных упругих модулей при фазовом переходе.

В третьей главе дан обзор литературы, посвященной уравнениям состояния в физике твердого тела и в механике сплошной среды, описано уравнение состояния Ми-Гройзена. Затем, для определения функции Гройзена использованы методы молекулярной динамики. Проведено моделирование различных типов кристаллов. Построены зависимости констант функции Гройзена от деформации. Исследована сходимость предлагаемых численных процедур, определены ошибки, вызванные использованием различного числа координационных сфер. Проведено моделирование с решением уравнений динамики как детерминированной, так и стохастической постановках. Показано соответствие полученных результатов моделирования между собой.

В заключении кратко перечислены основные результаты работы.

Список литературы содержит 122 источника.

При общей характеристике диссертации необходимо отметить, что в ней исследуются фундаментальные соотношения между микро и макропараметрами твердого тела. Такими исследованиями занимались великие ученые. Это обеспечивает научную значимость всей работы.

Вместе с тем имеется ряд недостатков. Основной заключается в отсутствии последовательного полного изложения материала. Стиль изложения больше напоминает научную статью. Обсуждаются только обобщенные параметры материалов: коэффициенты уравнений состояния, упругие модули, средняя кинетическая и потенциальная энергия сплошной среды на один атом (частицу). В результате, трудно

проверить некоторые сделанные автором выводы, для этого требуется прочитать помимо диссертации еще целый ряд статей.

Имеются и более частные замечания:

1. Фраза «Видим, что при отсутствии движения (6) полностью совпадает со следом тензора (4)» на стр.16 ошибочна. У величин (4) и (6) разные физические размерности.
2. Используемые автором выражения предполагают наличие у частиц ограничивающих стенок, в противном случае термодинамические соотношения, из которых выведены формулы, не работают. Но у твердого тела нет стенок, а количество учитываемых «сфер взаимодействия» необходимо обсуждать и обосновывать.
3. В главе 2 совершенно непонятно, откуда взят Рис.5 на стр. 38. Никаких объяснений и ссылок автор не дает. Более того, получить такую зависимость можно на основании решений задачи Коши, или краевой задачи, никаких упоминаний о соответствующих графикам рис.5 задачах, уравнениях и начальных условиях в работе нет. Не понятно, также, что такая величина То. То же самое касается Рис.7.
4. Там же сделано непонятное без дополнительных разъяснений утверждение о том, что колебания энергии в двумерном кристалле никогда не затухают полностью и СКО (непонятно чего) составляет приблизительно 1%.
5. В выводах по разделу 2.4, сделано заключение о том, что время релаксации энергии в системе частиц равно 10 То, а начальные скорости влияют на поведение системы на временах меньше То. Нет определения, что такое время релаксации и затухания. В любом случае, согласно теории дифференциальных уравнений в задаче Коши начальные условия полностью определяют решение, что такое «забывается начальное состояние» без дополнительных определений и уточнений не ясно.
6. На стр. 58 вводится коэффициент диссипации, но непонятно куда вводится, в какие уравнения.

Сделанные замечания не снижаю общего положительного впечатления от большой фундаментальной работы, проделанной соискателем. Считаю, что 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.

Член диссертационного совета

Доктор технических наук, заведующий лабораторией
прикладных исследований ИПМАШ РАН

30.11.2018

Полянский Владимир Анатольевич

Подпись Полянского В.А. удостоверяю
Заведующая сектором кадров

«Н» ноябрь 2018 г.
Э.В. Сталь