

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

Актуальность темы диссертации. Исследование фазовых и структурных переходов в кристаллах – важная составная часть теоретической физики твердого тела. Для изучения механизмов таких превращений на атомарном уровне используются эксперименты *in situ* в просвечивающем или сканирующем электронном микроскопе. Однако, постановка таких опытов очень сложна, а переходы изучаются либо в тонких фольгах, либо в поверхностных слоях. Другую возможность предоставляет метод молекулярной динамики (МД). Несмотря на все ограничения, связанные с приближенным описанием взаимодействия атомов посредством потенциалов, данный метод позволяет детально проследить перемещения атомов и изменения кристаллической решетки. Одним из важных вопросов, ответ на который может быть получен методом МД, является вопрос об устойчивости той или иной кристаллической структуры. **Фундаментально-научное значение** диссертации состоит в том, что она дает ответы на вопросы об устойчивости кристаллических структур и об их эволюции во времени и при внешних воздействиях. Оно состоит также в том, что в ходе выполнения исследований совершенствовался сам метод МД. Практическая значимость результатов имеет опосредованный характер и связана с о вкладом диссертации в развитие науки о фазовых превращениях.

Новизна результатов. Новыми являются выводы о совпадении областей устойчивости кристаллической структуры в пространстве деформаций с областями сильной эллиптичности уравнений механики деформируемого твердого тела и областями, для которых модули упругости положительны. Новыми является получение поправки для вычисления коэффициента Грюнайзена и установление согласованности результатов решения стохастической и эквивалентной детерминированной задачи, поставленной в терминах дисперсий и ковариаций.

Результаты диссертации следует признать **достоверными** ввиду использования современных апробированных методов реализации метода МД, согласованностью результатов, полученных методом МД с результатами, полученными другими методами.

Апробация. Результаты диссертации доложены на ряде российских и международных научных конференций. Имеется достаточное число публикаций в журналах, рекомендованных ВАК.

Связь работы с программами научных исследований. Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках ФЦП "Исследования и разработки по приоритетным направлениям развития научно-технологического комплекса России на 2014-2020 годы", Мероприятие 1.2., Соглашение о предоставлении субсидии № 14.575.21.0146 от 26.09.2017, уникальный идентификатор ПНИ: RFMEFI57517X0146.

№ 09/2-295 от 14.12.2018

Среди результатов, полученных в диссертации, особо можно отметить следующие. Очень интересен метод исследования устойчивости структур путем наложения неоднородной деформации, который позволил исследовать развитие дефектов кристаллической структуры, таких как дислокации, вакансии, границы двойников. Другой интересный результат – исследование форм устойчивости плоских структур, допускающих выход частиц из плоскости. Данный результат может быть применен при исследовании устойчивости графена при его деформировании. Несомненный интерес представляет возможность изучения процессов аморфизации кристаллов при больших пластических деформациях – явлению, которое активно изучается в настоящее время. Еще один важный результат – поправки, которые необходимо сделать для расчета коэффициента Грюнайзена.

Замечания.

1. Из пояснений на с.25 остается неясным, использовалось ли везде в работе выражение для энергии в виде (27). Фактически (27) – это уже не парный потенциал.

2. В формуле.(30) на с.26 тензор Q имеет ранг 4, а затем в формулах (35), (36) и др. этот же тензор имеет ранг 2.

3. Процедура определения устойчивости решетки (с.41) прописана недостаточно четко.

Сначала говорится "Подвергаем образец аффинной деформации, переводя его в новое равновесное состояние"; при этом не объясняется, почему это состояние обязательно равновесное.

Затем автор выполняет интегрирование уравнений движения и утверждает, что "Если конфигурация устойчива, то примерно $1/2 \tilde{K}_0$ переходит в потенциальную энергию и значение \tilde{K} осциллирует у данного уровня". Из текста неясно, откуда берется кинетическая энергия \tilde{K}_0 , учитывая, что до аффинной деформации кинетическая энергия была близка к нулю.

4. С.48. Отсутствует объяснение, почему упругие модули C^M_{1212} и C^M_{2121} не совпадают.

5. На с. 52 утверждается: "Границы, возникающие в следствии мартенситных фазовых превращений и двойникования в кристаллических телах, можно рассматривать как поверхности, на которых напряжения и перемещения непрерывны, а некоторые компоненты градиента тензора деформации претерпевают разрыв." (орфография автора).

Однако, из-за изменения упругих модулей при фазовом превращении некоторые компоненты тензора напряжения могут иметь разрыв на границе раздела фаз или двойников.

6. На с.54 говорится о прохождении дислокаций, но не указаны ни плоскости скольжения, ни векторы Бюргерса.

7. Границы двойников на электронномикроскопических изображениях обычно бывают прямолинейными или ступенчатыми. В диссертации отсутствует объяснение, почему при моделировании получены криволинейные границы двойников.

8. На рис. 32 (с.62) не видно минимума энергии для состояний с квадратной решеткой, соответствующих зоне сильной эллиптичности уравнений механического равновесия, несмотря на то, что согласно другим утверждениям автора, такие состояния должны быть равновесными.
9. Совпадение результатов расчета для детерминированной и стохастической задач не доказано, а проиллюстрировано только на одном примере расчета.
10. Имеется много необъясненных или недостаточно объясненных рассуждений и иллюстраций:
- На с.16 не указано, как ведется суммирование и не разъяснены обозначения a_k, A_k, F_k в формулах (4),(5);
 - на с.21 утверждается, что формула (22) сложнее для численной реализации, чем формула (12), поскольку содержит больше операций усреднения. Однако, из самих формул этого не видно;
 - на с.40 не сказано, какой температуре соответствует начальное состояние. По-видимому, она близка к 0 К;
 - с. 49: не указано, почему являются неустойчивыми состояния из области, обозначенной на рис.17 синим цветом;
 - на с.50 говорится: "Отрицательный модуль объемного сжатия наблюдается (рис. 19) в устойчивых точках, в которых были отрицательными одновременно оба модуля Юнга. "Как решетка может быть устойчивой, если какой-либо модуль отрицательный?
 - с.52: не объясняется, что такое амортизация материала;
 - на рис.37 показана схема перехода ГЦК решетки в ОЦК решетку. Схема Бейна не просматривается. Неясно, соответствует ли взаимная ориентация ГЦК и ОЦК ячеек, показанная на рис.37 ориентации, полученной при моделировании;
 - на с.53 говорится, что средняя кинетическая энергия образца примерно на шесть порядков меньше глубины потенциальной ямы D , но, к сожалению, не указано, какой температуре соответствует это возмущение;
11. Имеется много неразъясненных обозначений, неверных, нечетких или неудачных аргументаций и выражений, а также опечаток:
- на с.16 в формуле (4) диада, а в формуле (6) скалярное произведение имеют одинаковое обозначение $A_k F_k$;
 - на с. 25 использован оригинальный способ доказательства актуальности использования парного потенциала: "Не смотря на большое количество специализированных потенциалов исследование свойств парных взаимодействий является актуальным поскольку подавляющее большинство потенциалов содержат парную составляющую." (орфография автора);
 - на с.27 неправильное использование термина: " Будем проверять сильную эллиптичность отдельного деформированного состояния относительно малых возмущений, не рассматривая способ, которым система была приведена в это состояние". Сильной эллиптичностью может обладать оператор, но не состояние;
 - на с. 29 говорится о требовании "положительности кубического уравнения".

- д) на с. 73 сказано: " Тензор $\langle \tilde{A}_k \tilde{A}_k \rangle_r$ имеет диагональный вид. " Если тензор не является шаровым, то диагональный вид его матрица имеет только в главных осях. Какова ориентация этих осей относительно кристаллографических направлений в тексте не указано;
- е) на с.55 рис. 23а отображает картину, которая наступает позже, чем на рис. 23б. Логично было бы их поменять местами;
- ж) не указано, какая мера деформации использована для построения графика на рис. 30б. Для малой деформации ее значения слишком велики;
- з) не указаны единицы измерения напряжения на рис. 30б; возможно, на рис.30а по оси ординат отложен логарифм энергии;
- и) на с.78 без обоснования утверждается: " Тем не менее можно сделать вывод, что ранее оценки отношения соответствуют полученным значениям вплоть до температуры близких к температуре плавления" (орфография автора) Наверное, все же не вывод, а предположение;
- к) на с. 84, по всей видимости, пропущен знак усреднения по ансамблю при введении тензоров ковариаций и дисперсий перемещений и скоростей;
- л) очевидно, имеется опечатка в формуле (84) (номера n нет в левой части равенства)

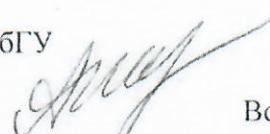
Сделанные замечания не носят принципиального характера. В основном они касаются неточностей описания, и опечаток и не могут поставить под сомнение общую положительную оценку диссертации, которая является законченным научным исследованием, содержащем новые интересные результаты.

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 физико-математических наук,

профессор кафедры теории упругости СПбГУ



Волков Александр Евгеньевич

13.12.2018