

ОТЗЫВ

Официального оппонента Болеста А. В. на диссертационную работу
Брюханова Ильи Александровича “Исследование влияния
наноразмерных включений и адсорбции газов на механические
свойства кристаллических материалов”, представленной на соискание
ученой степени кандидата физико-математических наук по
специальности 01.02.04 - механика деформируемого твердого тела.

Диссертация посвящена двум на первый взгляд разным вопросам. Это исследование механизмов пластической деформации кристаллических сплавов алюминия с медью при высоких нагрузках и моделированию упругих свойств цеолитов. Тем не менее эти вопросы тесно связаны тем фактом, что для рассмотрения как влияния на механические свойства кристаллов наноразмерных включений, так и адсорбции газов необходимо привлекать адекватные методы исследования, учитывающие атомную структуру материалов явным образом. Из этого следует, что **тема** диссертации И.А. Брюханова, посвященная именно молекулярно-динамическому исследованию влияния на механические свойства кристаллов наноразмерных включений и адсорбции газов **является актуальной** как в части объекта исследования, так и в методическом подходе.

Цель диссертационной работы Ильи Александровича Брюханова состоит в постановке и решении задач деформирования материалов с наноразмерными включениями.

Для достижения цели автор решил ряд задач, суть которых отражена в названиях глав и разделов, представленных в содержании работы.

В диссертации использованы теоретические методы исследования.

Эти методы опираются на метод классической молекулярной динамики и метод функционала плотности.

Объем и структура диссертационной работы. Диссертационная работа изложена на 170 страницах машинописного текста, включает 55 рисунков и 26 таблиц, состоит из введения, трех глав, заключения, четырех приложений и списка цитируемой литературы из 204 наименований как отечественных, так и зарубежных авторов. В списке литературы присутствуют девять статей,

индексируемых в базах данных Web of Science, Scopus и RCSI, в которых автором изложены основные результаты диссертации.

Краткий анализ содержания.

Во **введении** автор обосновывает актуальность и практическую значимость выбранной темы исследований, формулирует основные цели диссертационной работы, ее научную новизну, обосновывает достоверность диссертации и дает обзор существующих работ по изучению упругопластических свойств материалов с наноразмерными включениями.

Первая глава также носит обзорный характер и посвящена рассмотрению решаемых уравнений и используемых вычислительных методов. Это метод классической молекулярной динамики и метод функционала плотности. Подробно рассмотрены существующие потенциалы межатомного взаимодействия, методы расчета тензоров напряжения и деформаций.

Во **второй главе** исследуется кинетика пластической деформации сплавов алюминия с медью при ударно-волновом нагружении. Изучены детальные механизмы зарождения и развития дислокационных петель. Показано, что образованию такой петли предшествует наноразмерный локальный структурный переход ГЦК-ГПУ. На основе молекулярно-динамических расчетов предложена модель релаксации сдвиговых напряжений в сплаве. Впервые установлено, что механизмы образования новых дислокационных петель вносят основной вклад в степенную зависимость напряжения от скорости пластической деформации, наблюдаемую в эксперименте за фронтом ударной волны. Также рассмотрены механизмы зарождения и распространения дислокаций вблизи зоны Гинье-Престона.

В **третьей главе** исследовано влияние физической и химической адсорбции углекислого газа на упругие свойства цеолитов. Впервые изучены модули упругости пористых кристаллов при химических процессах, в которых при адсорбции углекислого газа образуются карбонаты и гидрокарбонаты. Эффект изменения модулей упругости для кристаллов цеолитов рассчитан с помощью метода молекулярной механики и метода функционала плотности, а для

поликристаллов с помощью осреднения Фойгта-Ройсса-Хилла. Впервые исследовано теоретически влияние процесса деалюминирования при обработке цеолитов парами воды, применяемого в промышленности для приготовления кислотных катализаторов, на упругие свойства цеолитов.

В заключении перечислены основные результаты работы.

1. Построена модель релаксации сдвиговых напряжений в сплаве алюминия с медью на основе полученных в молекулярно-динамических расчетах аппроксимациях скорости зарождения и распространения дислокационных петель. Впервые установлено, что механизмы образования новых дислокационных петель вносят основной вклад в степенную зависимость напряжения от скорости пластической деформации, наблюдаемую в эксперименте за фронтом ударной волны.

2. Методом молекулярной динамики исследованы детальные механизмы зарождения и распространения частичных дислокаций в сплавах алюминия с медью и вблизи зон Гинье-Престона. Впервые показано, что образованию петли частичной дислокации предшествует образование наноразмерного дефектного кластера, а петля в процессе движения может трансформироваться в двойник или в петлю полной дислокации.

3. Проведено моделирование упругих свойств катионных форм цеолитов, в котором свойства отдельных кристаллов вычислялось на атомно-молекулярном уровне, а свойства поликристаллов определялись осреднением Фойгта-Ройсса-Хилла. Впервые показано согласие расчетов упругих характеристик поликристаллических катионных форм цеолитов с экспериментальными данными. Исследовано влияние адсорбции углекислого газа, воды и дефектов структуры на упругие свойства цеолитов.

Результаты диссертации достоверны, так как получены путем применения признанных в мире и уже ставших классическими методов молекулярной динамики и функционала плотности.

Результаты диссертации являются новыми. Новизна результатов подтверждена их **апробацией** при обсуждении на представительных конференциях и семинарах.

Автореферат правильно и полно отражает содержание диссертации и оформлен в соответствии с установленными требованиями.

По тексту диссертации необходимо сделать некоторые **замечания**:

1. На стр. 43 диссертации приводятся формулы численного интегрирования уравнений движения, соответствующие алгоритму leap-frog, в котором шаг интегрирования скоростей атомов по времени сдвинут на полшага относительно шага интегрирования для координат. В то же время в молекулярно-динамическом пакете LAMMPS, который использует автор реализован другой алгоритм - Velocity Verlet.
2. В тексте диссертации отмечено, что шаг по времени в молекулярно-динамических расчетах равнялся 1 фемтосекунде, что, как известно, вполне достаточно для моделирования процессов в металлах при умеренных температурах и в случае малых скоростей деформации. При этом отсутствует анализ ошибки, возникающей, например, при увеличении температуры до 700 К, либо в случае ударно-волнового нагружения.
3. При сравнении с экспериментальными данными на стр. 76 диссертации указано, что предэкспонента J_0 в работе полагалась равной 10^{15} с^{-1} , но там же приводится экспериментальное числовое значение для платины, обладающей такой же кристаллической структурой, равное $3 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$, то есть меньшее на 19 порядков величины, при этом столь большое отличие никак не комментируется. Также не обсуждается зависимость J_0 от процентного количества меди в сплаве.

Отмеченные недостатки не затрагивают существа полученных автором результатов.

Заключение

Рецензируемая работа представляет собой законченный труд, является ценным вкладом в механику деформируемого твердого тела на микроуровне, расширяет физические представления о механизме упругопластического деформирования материалов с наноразмерными включениями.

Диссертация “Исследование влияния наноразмерных включений и адсорбции газов на механические свойства кристаллических материалов” отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В. Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 01.02.04 – “Механика деформируемого твердого тела” (по физико-математическим наукам) и удовлетворяет критериям, приведенным в пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а также оформлена согласно приложениям № 5, 6 Положения о диссертационном совете Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова. Таким образом, соискатель Брюханов Илья Александрович безусловно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 - механика деформируемого твердого тела.

Официальный оппонент:

Кандидат физико-математических наук
по специальности 01.02.04 - механика
деформируемого твердого тела,
старший научный сотрудник ИТПМ СО
РАН,

Адрес: 630090, г. Новосибирск, ул.
Институтская 4/1

Мобильный телефон: 8 (913) 394-65-76

Email: bolesta@itam.nsc.ru

Боле́ста Алексе́й
Владимирович



23 мая 2018 г.

Подпись А.В. Боле́ста заверяю:

Ученый секретарь ИТПМ СО РАН к.ф.-м.н.



Кратова Ю.В.