

ОТЗЫВ

официального оппонента А. М. Кривцова на диссертационную работу Брюханова Ильи Александровича «Исследование влияния наноразмерных включений и адсорбции газов на механические свойства кристаллических материалов», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 - Механика деформируемого твердого тела.

В настоящее время, благодаря развитию нанотехнологий, появилась возможность активно влиять на внутреннюю структуру материалов. Это потребовало совершенствования методов атомистического моделирования, позволяющих предсказывать свойства материалов на различных масштабных уровнях. Развитие суперкомпьютерных вычислений позволило с высокой точностью моделировать механические процессы в твердых телах на атомно-молекулярном уровне, учитывая внешние силы и межатомные взаимодействия. Переход на данный масштабный уровень позволяет качественно расширить возможности для построения моделей механики деформируемого твердого тела и определения параметров определяющих соотношений. Для твердых тел с характерными размерами до 100 нанометров методы атомистического моделирования позволяют полностью определить их напряженно-деформированное состояние, что чрезвычайно важно для предсказания поведения материалов при сложных физико-механических воздействиях. Сказанное подтверждает **высокую актуальность** темы рассматриваемой диссертационной работы.

В диссертационной работе рассматриваются две основные задачи: первая связана с исследованием пластических свойств сплавов алюминия с медью при ударно-волновых нагрузках, а вторая — с изучением упругих свойств кристаллических материалов с регулярно расположенными порами (цеолитов). Каждая из этих задач представляет самостоятельный интерес и обладает **практической значимостью**. При моделировании высокоскоростной обработки материалов необходимо уметь вычислять не только напряжение и деформации в

них, но также и распределение дефектов, например, дислокаций. В связи с этим определение параметров зарождения и распространения дефектов является важной практической задачей. Цеолиты являются алюмосиликатами с очень большой площадью внутренней поверхности пор, позволяющей им адсорбировать большие объемы газов. Изучение влияния адсорбции вещества, а также различных структурных параметров (размера пор и каналов, состава) на упругие свойства является задачей механики деформируемого твердого тела, важной для практического выбора и применения различных форм цеолитов в конкретных устройствах.

Объем и структура диссертационной работы. Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения, четырех приложений и списка цитируемой литературы.

Во **введении** изложено обоснование актуальности и практической значимости выбранной темы исследований, сформулированы основные цели работы и ее научная новизна, представлен литературный обзор работ по механизмам и кинетике дислокационной пластичности металлов, по исследованию упругих свойств пористых материалов, в том числе цеолитов, а также по использованию методов молекулярной динамики при решении задач механики деформируемого твердого тела.

Первая глава носит обзорный характер и посвящена рассмотрению используемых в диссертации вычислительных методов. Представлено подробное описание метода классической молекулярной динамики и метода функционала плотности решения уравнения Шредингера системы взаимодействующих атомов и электронов. Подробно рассмотрены используемые в диссертации потенциалы межатомного взаимодействия и методы расчета макроскопических величин, таких как тензор напряжения, температура и энергия. Также представлены формулы для анализа упругих свойств кристаллов и поликристаллов, использующие формулы поворота тензора модулей упругости и осреднения Фойгта-Ройсса-Хилла, соответственно.

Во **второй главе** исследуется кинетика пластической деформации сплавов алюминия с медью при ударно-волновом нагружении. Особое внимание уделяется изучению детальных атомных механизмов зарождения и развития

дислокационных петель. В результате было показано, что образованию петли частичной дислокаций предшествует образование наноразмерного дефектного кластера, соответствующего локальному структурному переходу ГЦК-ГПУ. Распространение же частичной дислокационной петли может сопровождаться образованием двойника, либо трансформацией ее в полную дислокацию. Кинетика зарождения дислокаций была рассчитана с помощью прямых молекулярно-динамических расчетов, в котором среднее время до зарождения дислокации рассчитывалось по анализу статистики времен, полученных при одних и тех же температурах и напряжениях, но используя различные распределения Максвелла для задания температуры. Скорость зарождения дислокаций была аппроксимирована формулой аррениусовского типа, в которой определены зависимости активационных параметров (энергии и объема) от температуры. Используемый метод определения скорости зарождения дислокаций потребовал проведения большого количества расчетного времени.

Кинетика зарождения дислокаций использовалась при построении модели релаксации сдвиговых напряжений за фронтом ударной волны. В этой модели рассматривалось два механизма изменения плотности дислокаций: за счет роста имеющихся дислокаций и зарождения новых. Автором диссертации было показано, что механизмы образования новых дислокационных петель вносят основной вклад в степенную зависимость напряжения от скорости пластической деформации, наблюдаемую в эксперименте за фронтом ударной волны.

Третья глава посвящена исследованию упругих свойств цеолитов в процессах адсорбции углекислого газа и воды. Впервые теоретически показано, что образование карбонатов в процессе адсорбции углекислого газа и появление дефектов в результате обработки цеолитов парами воды приводит к снижению упругих свойств цеолита.

В заключении перечислены основные результаты работы.

Результаты диссертации достоверны, так как для их получения использовались методы молекулярной динамики и функционала плотности, апробированные большим количеством исследователей, а также аппарат классической механики сплошных сред.

Все **результаты**, полученные в диссертации, **являются новыми**. Отметим наиболее важные из них:

1. Определена кинетика зарождения и распространения дислокаций в сплавах алюминия с медью и проведен анализ напряжений и скоростей пластических деформаций за фронтом ударной волны.
2. Изучено влияние адсорбции углекислого газа и воды на упругие свойства цеолитов, продемонстрирована возможность изменения ауксетических свойств при гидратировании цеолитов.

Основное содержание диссертации изложено в 7 работах в рейтинговых журналах из списка Web of Science, Scopus и RCSI. Это свидетельствует о высокой публикационной активности автора, высоком уровне и научной значимости полученных результатов. **Апробация результатов** диссертационной работы **подтверждена** их обсуждением на конференциях и семинарах. Автореферат диссертации полностью отражает основное содержание и выводы работы.

Диссертация написана последовательно и четко. Иллюстративный материал подобран грамотно. Основные выводы хорошо аргументированы. К диссертационной работе имеется ряд **замечаний**:

1. В автореферате недостаточно подробно описан способ задания ударного деформирования для моделирования процесса зарождения дислокаций;
2. При моделировании развития дислокаций за фронтом ударной волны осуществлялось мгновенное наложение деформации. Было бы целесообразно проанализировать влияние скорости наложения деформации на изменение внутренней структуры материала;
3. Для дальнейших исследований представляет интерес сравнительный анализ кинетики пластической деформации в металлах с другой кристаллической структурой (ОЦК, ГПУ);
4. Работу бы украсило более подробное обсуждение возможностей практического применения полученных результатов по исследованию упругих свойств цеолитов.

Перечисленные замечания не затрагивают сути и основных выводов работы и не снижают **высокую положительную оценку** диссертационной работы.

Диссертант продемонстрировал высокий уровень владения как аналитическими, так и численными методами. Особо следует отметить визуальное представление результатов исследования. В целом, диссертационная работа является законченным научным исследованием, которое вносит заметный вклад в развитие механики деформируемого твердого тела. Полученные в ней результаты и разработанная методика исследования расширяют возможности механики при построении моделей деформируемых твердых тел и определении параметров определяющих соотношений.

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 п. 3.1. этого положения.

Считаю, что соискатель Брюханов Илья Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 — Механика деформируемого твердого тела.

Официальный оппонент:

Заведующий кафедрой «Теоретическая механика»,
Санкт-Петербургского политехнического
университета Петра Великого,
Д.ф.-м.н., профессор РАН, член-корреспондент РАН



Кривцов Антон
Мирославович
25.05.2018

Адрес: 195251, Санкт-Петербург, Политехническая, 29

Тел.:(911)121-40-35, E-mail: akrivtsov@bk.ru

Подпись А.М. Кривцова заверяю:

Ведущий специалист по кадрам

Васильева М.А.