

ОТЗЫВ

официального оппонента проф. Лурье С.А. 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 исследованию упругих и пластических свойств кристаллических материалов с использованием методов атомистического моделирования. Благодаря развитию суперкомпьютерных вычислений появилась возможность моделировать механические воздействия на твердые тела на атомно-молекулярном уровне. Развитие методов атомистического моделирования, повышение их точности и достоверности не только дает эффективный инструмент для изучения свойств однородных и неоднородных материалов в различных условиях нагружения, но также позволяет использовать результаты атомистического моделирования в качестве численных экспериментов, в частности для решения проблемы идентификации параметров определяющих соотношений новых материалов с развитой микроструктурой.

Поэтому тема диссертации И.А. Брюханова, в которой не только исследуются упругие и пластические свойства материалов методами атомистического моделирования, но и предлагается развитие этих методов, несомненно, является **актуальной**.

Объем и структура диссертационной работы. Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения, четырех приложений и списка цитируемой литературы. Общий объем диссертации 170 страниц, список литературы содержит 204 наименования.

Во **введении** освещен круг вопросов, охваченный диссертацией, охарактеризована актуальность и новизна работы, ее практической значимость, сформулированы основные цели работы, представлен обзор работ по дислокационной пластичности металлов, а также по цеолитам и их упругим свойствам.

Первая глава носит обзорный характер. В ней разобраны вычислительные методы. Описаны методы классической молекулярной динамики, которые дополняются данными из квантово-механических расчетов, метод функционала плотности. Разобран вывод вириальной формулы тензора напряжения. Даны формулы расчета упругих свойств поликристаллов, по известной матрице модулей упругости кристаллита, так называемые формулы осреднения Фойгта-Ройсса-Хилла.

Во второй главе исследуются механизмы и кинетика пластической деформации сплавов алюминия с медью при ударно-волновом нагружении. В этой главе, главным образом, рассмотрены три задачи: исследование механизмов зарождения и распространения дислокационных петель, определение скорости зарождения из МД расчетов и построение модели релаксации напряжений.

По первой из этих задач автор получил результат, что петля частичной дислокации зарождается из дефектного кластера, который является структурным переходом ГЦК-ГПУ, а также что петля при движении может трансформироваться в дефекты другого типа, такие как двойник и полная дислокация. Во второй задаче автор определил зависимости скорости зарождения дислокаций вблизи медных включений в алюминии и аппроксимировал их.

Модель упруго-пластического деформирования сплава алюминия с медью была построена в предположении, что дислокационные петли могут зарождаться и увеличивать свою длину при движении. С ее помощью автор смог проанализировать релаксации сдвиговых напряжений за фронтом ударной волны. Построены зависимости напряжений от скорости пластической деформации и проведено сравнение с экспериментом. Показано, что степенная экспериментальная зависимость обусловлена механизмами появления новых дислокационных петель.

Третья глава посвящена исследованию упругих свойств цеолитов - пористых кристаллических материалов методом функционала плотности с помощью осреднения Фойгта-Ройсса-Хилла. Изучено влияние углекислого газа и воды, а также дефектов структуры на упругие свойства цеолитов. По результатам моделирования сделаны выводы, что физическая адсорбция CO_2 увеличивает упругие модули, а химическая с образованием карбонатов снижает, а также что

при dealюминировании снижаются упругие свойства цеолита H_Y. Показано хорошее согласие расчетных данных с экспериментом.

В заключении перечислены основные результаты работы.

Основные **результаты диссертации**, полученные в главах 2 и 3, являются **новыми**. По теме диссертации опубликованы в 7 работах в ведущих рецензируемых научных журналах Web of Science, Scopus и RCSI.

Результаты, полученные в диссертации, имеют **практическое значение**, так как они способствуют развитию физических моделей упруго-пластического тела при высокоскоростной деформации и важны для анализа экспериментальных данных по ударно-волновому нагружению металлов. Также они могут использоваться при конструировании устройств, содержащих цеолиты.

Достоверность результатов диссертации подтверждается использованием апробированных методов исследования и сравнением с экспериментальными данными.

Основные положения исследования были представлены на всероссийских и международных конференциях, докладывались на научных семинарах. Автореферат диссертации полностью отражает основное содержание и выводы работы.

Отметим некоторые **замечания**, возникшие при анализе диссертации:

1. В работе используются методы молекулярной динамики (МД) и квантово-механические методы. Использование последних для определения упругих свойств весьма ограничено, ибо современные численные технологии позволяют рассматривать лишь системы с «малым размером (300 атомов).
 - Что дает при расчете упругих свойств и других параметров учет распределения электронов по молекулярным или кристаллическим состояниям вещества. Когда можно ограничиться МД?
 - Есть ли критерии, которые позволяют оценить необходимость привлечения квантово-механических методов? Наконец, неясно ведет ли использование этих методов к уточнению, ибо представительный фрагмент при использовании последних весьма мал?
2. Для нахождения упругих свойств поликристаллических материалов используется весьма грубый метод Хилла, сводящийся к осреднению соотношений Фойгта и Рейса, хотя в механике композитов известны и более точные аналитические оценки.

3. В разделе 1.1.2. указываются правила выбора начальных и граничных условий, которые сводятся в выбору положений атомов в кристаллической решетке и их начальных скоростей.

Однако в работах Г. Нормана, В. Стегайлова и др. специалистов в области МД утверждается, что, как правило, одного начального состояния недостаточно для достижения удовлетворительной точности. Требуется задавать ансамбль начальных состояний, необходимых для получения ряда МД-прогонов и получения усреднение результатов. Каждое микроскопическое состояние в ансамбле должны отличаться друг от друга, но относиться к макроскопическим рассмотрением изучаемого неравновесного состояния. Отмечается в частности, что последнее требование требует некоторые искусства и может быть проверено по следующему критерию: увеличение числа прогонов I для получения осреднений увеличивает точность вычислений как \sqrt{I} , не сдвигая значения средней величины.

4. К сожалению, в работе вопрос точности результатов моделирования отражен недостаточно, неясно какие параметры существенны с этой точки зрения, как должны быть выбраны параметры, характеризующие точность и какие средства используются для ее достижения?

5. Рис. 2.5 обсуждается как цветной, хотя он является черно- белым.

6. Понятие фононное трение (ФТ) используется неоднократно при трактовке результатов. Однако в работе почти не говорится о расчете фононного трения (коэффициента ФТ, его зависимости от температуры и о методах его определения)

7. Желательно было бы пояснить, как можно использовать оценку скорости увеличения длины дислокационной петли для оценки скорости увеличения плотности дислокаций стр. 65 (формула (2.1)). Кажется, имеется неточность в формуле (2.1).

8. Непонятной является фраза на стр. 70 «При аппроксимации по формуле (2.4) определялись уравнения экспонент наибольшего и наименьшего наклона, проходящие через вертикальные отрезки значений J , соответствующие погрешностям при их вычислении (рис. 2.11)»

Во-первых, вертикальных отрезков значений J фактически не существует, во-вторых неправильно указан номер рисунка в последней ссылке.

9. Можно сделать общее замечание, относящееся ко всему тексту диссертации: Изложение, носит повествовательный характер без акцентов и пояснений какие же результаты являются новыми, а какие подтверждают

полученные ранее результаты. Этого нет даже в заключительных разделах глав.

В случае получения результатов, найденных ранее другими авторами, не указано, какие из результатов являются более полными и точными, если результаты не совпадают. Автор ограничился фразой, что «...для проверки точности...целесообразно проводить сравнение с данными расчетов полученными методами квантовой механики» (стр. 75) Однако это предложение, кажется не реализовано в работе?

10. При исследовании зависимости свойств нанопористых структур- цеолитов от адсорбции углекислого газа использовались и метод МД и квантово-механические методы.

- Хотелось бы, чтобы в диссертации давалась краткая характеристика используемых квантово-механических подходов. Этого почти нет. Тем не менее, полученные результаты сравниваются с результатами, полученными с использованием различных подходов, характеристика которых в работе фактически отсутствует (очень кратко отмечается лишь на стр. 100).

- Желательно было бы указать на особенности реализации метода МД, позволяющие получить эффективные свойства с достаточной точностью. Эта информация важна для широкого класса задач, когда, например, методы прямого моделирования могли бы использоваться для идентификации неклассических определяющих соотношений.

- Наконец, непонятно снова в какой степени результаты, полученные в главе 3 (в том числе и учет влияния воды и исследование цеолитов на ауксетичность) являются новыми, сравнивались ли полученные ранее результаты других авторов с экспериментальными данными, является ли реализованный в диссертации подход более точным?

- Хотелось бы иметь оценки того, насколько значительными могут быть уточнения, получаемые в результате использования квантово-механических методов дополнительно к МД методам? Надежны ли такие оценки, В каких случаях использование квантово-механических методов необходимо?

Отмеченные недостатки не затрагивают сути и основных выводов работы и не снижают **высокую положительную оценку** диссертационной работы. Брюхановым Ильей Александровичем была проделана большая работа по развитию методов молекулярной динамики для исследования упругих и пластических свойств кристаллических материалов. В целом, диссертационная

работа является законченным научным исследованием, которое вносит заметный вклад в развитие механики деформируемого твердого тела.

На основании вышесказанного считаю, что диссертация отвечает всем критериям «Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова» и соответствует паспорту специальности 01.02.04 – “Механика деформируемого твердого тела” (по физико-математическим наукам), а ее автор, **Брюханов Илья Александрович**, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 - Механика деформируемого твердого тела.

Официальный оппонент:

Доктор технических наук по специальности 01.02.04 - механика деформируемого твердого тела, главный научный сотрудник, заведующий лабораторией «Неклассические модели механики композиционных материалов и конструкций» Института прикладной механики РАН,

Адрес: 125040, г. Москва, Ленинградский проспект 7,

Телефон: 8 (495) 946-18-06,

email: iam@iam.ras.ru

телефон: +7-903-794-72-79

25 мая 2018 г.

Подпись С.А. Лурье заверяю:

Ученый секретарь ИПРИМ РАН,

к.ф.-м.н.

Лурье Сергей

Альбертович



Карнез Ю.Н.