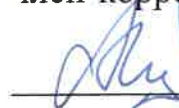


«УТВЕРЖДАЮ»

Директор Федерального государственного  
бюджетного учреждения науки «Институт  
теоретической и прикладной механики им. С.А.  
Христиановича» Сибирского отделения Российской  
академии наук, доктор физико-математических наук,  
член-корреспондент РАН



Александр Николаевич Шиплюк

« 2 » сентября 2020 г.

## ОТЗЫВ

ведущей организации на диссертационную работу  
Кузькина Виталия Андреевича «Термомеханические процессы в твердых  
телах с микроструктурой», представленную на соискание учёной степени  
доктора физико-математических наук по специальности 01.02.04 –  
«Механика деформируемого твердого тела»

### **Актуальность темы диссертационного исследования.**

Актуальность темы работы обусловлена необходимостью расчета термоупругих полей в материалах и конструкциях при различных внешних воздействиях на микро- и наноуровне. Континуальная теория линейной термоупругости хорошо описывает поведение материалов на макроуровне. Так, например, задача об определении поля температуры, вызывающего термоупругие напряжения, на макроуровне в большинстве случаев успешно решается с использованием закона теплопроводности Фурье. Данный закон описывает диффузионный перенос тепловой энергии, характерный для макроскопических систем. Однако эксперименты последних лет показывают, что на микро- и наноуровне тепловая энергия может распространяться волновым образом (баллистически). В частности, показано, что во многих материалах, включая нанопроволоки, углеродные нанотрубки, графен, кремниевые мембраны и др. наблюдаются существенные отклонения от закона Фурье. В связи с этим актуальность приобретает разработка механических моделей, описывающих термоупругое поведение деформируемых твердых тел с учетом баллистического переноса тепловой энергии. Данная задача особенно важна, в частности, в связи с развитием микропроцессорной техники и необходимостью отвода тепла от процессоров.

Работа В.А. Кузькина направлена на развитие подходов к аналитическому описанию термоупругого деформирования, переходных процессов и волнового переноса энергии на различных масштабных уровнях.

Результаты работы способствуют развитию механики деформируемого твердого тела и ее эффективному использованию для решения актуальных практических задач на микро- и наноуровне.

### **Структура и содержание диссертационной работы.**

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения.

**Первая глава** посвящена подходу, описывающему упругое деформирование кристаллических твердых тел с вакансиями на примере двумерной треугольной решетки. Вакансия моделируется с помощью введения дополнительных связей с отрицательной жесткостью. Определено точное поле перемещений в решетке при двухосном деформировании. Показано, что в отличие от соответствующего решения задачи линейной теории упругости, при объемном деформировании поле перемещений не обладает центральной симметрией и немонотонно убывает с увеличением расстояния от центра вакансии. Показано, что влияние вакансий на упругие свойства может быть описано в рамках линейной теории упругости. В данном случае решетка с вакансиями представляется в виде пластины с вырезами. Исследовано влияние вакансий на эффективные упругие и прочностные свойства решетки. Определены коэффициенты концентрации деформации при объемном и одноосном нагружении решетки с одиночной вакансией. Проведено сравнение с результатами численного решения задач о деформировании решетки со случайным распределением вакансий и с решением ряда задач линейной теории упругости. Сделаны выводы о применимости континуальных методов для описания полей перемещений, создаваемых вакансиями, а также влияния вакансий на эффективные упругие свойства кристаллов.

**Вторая глава** посвящена переходным процессам, протекающим в упругих твердых телах с кристаллической структурой на примере бесконечных идеальных кристаллических решеток простой и сложной структуры. Аналитически и численно исследованы два переходных процесса: перераспределение энергии по степеням свободы и уравнивание кинетической и потенциальной энергий. Предложенный подход применен к ряду конкретных решеток: одномерная цепочка с чередующимися массами и жесткостями; квадратная решетка, совершающая поперечные колебания; решетка графена, совершающая поперечные колебания; двумерная квадратная решетка; двумерная треугольная решетка. Для данных решеток была решена задача о колебаниях кинетической энергии в случае, когда частицы имеют случайные начальные скорости и нулевые перемещения. Для решеток, элементарная ячейка которых имеет несколько степеней свободы, решена задача о перераспределении энергии по степеням свободы.

Полученные результаты могут быть использованы при формулировании определяющих соотношений для многокомпонентных моделей механики сплошных сред, например, для описания лазерного воздействия на деформируемое твердое тело.

**В третьей главе** рассматривается перенос энергии в упругих кристаллических телах на примере идеальных кристаллических решеток простой и сложной решеток. Разработан подход, описывающий в континуальном приближении перенос кинетической энергии по кристаллу за счет упругих волн. С использованием данного подхода получены точные и приближенные формулы, описывающие изменение начального распределения кинетической энергии в решетке во времени, связанные с баллистическим переносом энергии. Предложенный подход применен к ряду конкретных решеток: скалярные решетки, имеющие одну степень свободы на элементарную ячейку; сложные гармонические решетки; одномерная цепочка на упругом основании. Для скалярных решеток, имеющих одну степень свободы на элементарную ячейку, применен подход, использующий в качестве основных переменных ковариации скоростей частиц. Получены решения данных уравнений, позволяющие, в частности, вычислить поле кинетической энергии в решетке в данный момент времени. С использованием разработанного подхода решен ряд задач о переносе энергии в квадратной решетке, совершающей поперечные колебания: задачи о ступенчатом, круговом и синусоидальном распределении начальной кинетической энергии.

Для сложных гармонических решеток получено решение уравнений движения частиц решетки. С использованием точного решения выведены точная и приближенная формулы для матрицы, состоящей из кинетических энергий, соответствующих степеням свободы элементарной ячейки. С использованием приближенной формулы получены решения задач с точечным, ступенчатым и синусоидальным распределениями начальной кинетической энергии. Данные решения подходят для широкого класса сложных решеток с взаимодействием произвольного числа соседей. В частности, данные решения применены для описания переноса энергии в одномерной цепочке с чередующимися массами и двумерной решетке графена, совершающей поперечные колебания. Для решетки графена показано, что несмотря на изотропию упругих свойств, перенос энергии в ней существенно анизотропен.

На примере одномерной цепочки на упругом основании исследован вопрос о поведении энергии при кинематическом и силовом воздействии. Показано, что энергия системы растет только в том случае, если частота внешнего воздействия находится внутри спектра собственных частот цепочки. С использованием асимптотических методов получены простые приближенные формулы, описывающие рост энергии системы на больших временах.

Изложенная в данной главе теория может использоваться для постановки и интерпретации экспериментов по изучению баллистического распространения тепла. В частности, полученное аналитическое решение задачи о затухании синусоидального теплового профиля может использоваться на практике для интерпретации экспериментальных данных, получаемых методом «transient thermal grating».

**Четвертая глава** посвящена подход к получению определяющих соотношений, связывающих в адиабатическом приближении давление, объем и тепловую энергию кристаллических твердых тел с парными силовыми взаимодействиями. Полученные определяющие соотношения позволяют рассчитывать поля термоупругих напряжений в кристаллических твердых телах. Предложенный подход применен к ряду конкретных решеток: квазиодномерная цепочка; двумерные и трехмерные кристаллы с парными силовыми взаимодействиями.

Для квазиодномерной цепочки исследована связь тепловой энергии и возникающего в результате теплового расширения/сжатия давления при различных значениях силы натяжения. Выведена зависимость параметра Грюнайзена, характеризующего наклон зависимости теплового давления от тепловой энергии в нуле, от натяжения цепочки. Показано, что для потенциалов типа Ланнарда-Джонса параметр Грюнайзена квазиодномерной цепочки меняется в интервале от минус бесконечности (для нерастянутой цепочки) до плюс бесконечности (вблизи максимальной деформации). Выведено нелинейное определяющее соотношение, связывающее давление и тепловую энергию. Данное уравнение качественно описывает поведение цепочки при всех значениях деформации и не слишком больших тепловых энергиях.

Для двумерных и трехмерных кристаллов проведено разложение тензора напряжений и тепловой энергии в ряд по малому параметру, характеризующему деформации связей, вызванные тепловым движением. Получены выражения, связывающие коэффициент Грюнайзена и коэффициент теплового расширения с параметрами потенциала взаимодействия. С использованием данного выражения выведено условие, при котором тепловое расширение становится отрицательным. Показано, что для того чтобы тепловое расширение было отрицательным, достаточно геометрической нелинейности колебаний частиц. В частности, кристалл с физически линейными взаимодействиями в двумерном и трехмерном случае демонстрирует отрицательное тепловое расширение.

В диссертации получены **новые фундаментальные научные результаты**, способствующие развитию методов решения задач механики деформируемого твердого тела на микро- и наноуровне.

**Автореферат** диссертации соответствует ее содержанию, отражает актуальность темы исследования, ее цели и задачи, научную новизну, практическую значимость, обоснованность и достоверность научных положений, результатов и выводов, сформулированных в диссертации.

**Достоверность результатов диссертации** обеспечена строгой математической постановкой задач, применением математически обоснованных методов решения, а также сравнением аналитических выкладок с результатами численного моделирования.

### **Основные результаты, их научная новизна и значимость.**

**Научную новизну** диссертационной работы В.А. Кузькина представляют следующие результаты, выносимые на защиту:

1. Предложен подход, позволяющий описывать влияние вакансий на упругие и прочностные свойства кристаллов. Получено аналитическое решение задачи о деформировании двумерной треугольной кристаллической решетки с двояко-периодической системой вакансий.

2. Развита подход к описанию переходных процессов в кристаллических твердых телах с произвольной сложной решеткой в линейном приближении. Получено аналитическое решение, описывающее уравнивание кинетической и потенциальной энергий и перераспределение кинетической энергии по степеням свободы элементарной ячейки.

3. Развита подход к континуальному описанию переноса энергии в кристаллических твердых телах с произвольной сложной решеткой в линейном приближении. Выведена формула, описывающая изменение во времени начального поля кинетической энергии в бесконечном кристалле.

4. Развита подход к описанию термоупругого поведения кристаллических твердых тел с баллистическим переносом тепловой энергии. Аналитически и численно решена задача термоупругости для цепочки Ферми-Паста-Улама с начальным периодическим распределением температуры. Показано, что в данной задаче возникает резонанс, вызванный совпадением частот колебаний температурного поля с собственными частотами механических колебаний системы.

### **Теоретическая и практическая значимость работы.**

Работа имеет теоретический характер. Практическая значимость работы связана с возможностью использования полученных результатов для расчета полей термоупругих напряжений и температуры в кристаллических твердых телах, содержащих малое количество дефектов. В частности, получаемые результаты могут использоваться при решении задач упругости и прочности материалов и конструкций на наноуровне, при построении определяющих соотношений для многокомпонентных моделей механики сплошной среды при описании поведения кристаллических материалов в сильно неравновесных условиях (например, при лазерном воздействии), при описании переноса энергии случайных колебаний в кристаллических твердых телах и метаматериалах, при описании термоупругого поведения твердых тел.

### **Апробация работы.**

Все основные положения работы в полной мере опубликованы в научных журналах по специальности диссертации, в том числе 17 — в изданиях, реферируемых международными базами цитирования Web of Science и Scopus. Указан личный вклад соискателя в каждую из публикаций, который оценивается как значительный. Результаты докладывались соискателем на нескольких десятках международных и всероссийских научных конференций по научной специальности диссертации. Выполнение

работы на различных этапах ее выполнения было поддержано грантами РФФИ и РНФ, прошедшим тщательную научную экспертизу.

### **Замечания по диссертационной работе.**

Несмотря на общий положительный отзыв на диссертацию имеются и отдельные замечания.

Прежде всего, название работы «Термомеханические процессы в твердых телах с микроструктурой» несколько расплывчато и не несет никакой детализирующей информации. Предметом всей механики деформируемого твердого тела являются всевозможные термомеханические процессы в твердых телах. Кроме того, и все твердые тела обладают микроструктурой. По этим причинам название не передает информацию о содержании диссертации.

В разделе диссертации «Цели и задачи» (стр.8) перечисляются задачи, в том числе: «Разработка подходов к описанию процессов термоупругого деформирования и волнового процесса переноса энергии в кристаллических твердых телах на микро- и наноуровне». В то же время, в разделе «Методы исследования» (стр.9) говорится, что «Основным методом исследования, используемым в данной работе ... является метод динамики частиц». Но на микро- и наноуровне «частицами» являются атомы. Такое использование терминов («частица» или атом) очень затрудняет чтение текста. Например, на стр. 97 в разделе 2.3.7.2 рассматриваются «...поперечные колебания растянутого графенового листа». Перед формулой (2.161) находится предложение «Элементарные ячейки, содержащие по две частицы...». Но графен – это двумерная аллотропная модификация углерода, образованная слоем атомов углерода толщиной в один атом. Что же тогда подразумевал автор на стр. 97 (частицу или атом)?

Возвращаясь к стр.8 – 9, необходимо задать еще один вопрос автору. Если рассматриваются твердые тела на микро- и наноуровне, значит рассматриваются атомы. Тогда при использовании «метода динамики частиц», которые являются атомами, необходимо использовать систему уравнений аналитической механики, например уравнения Гамильтона, как это делается в огромном количестве работ при использовании метода молекулярной динамики. Однако в работе такая система уравнений не использовалась ни разу.

На стр.7 правильно подчеркивается, что кинетическая температура пропорциональна энергии хаотического теплового движения атомов. Однако, для того, чтобы рассчитать эти величины, необходимо разбить полную систему атомов на атомные подсистемы и найти координаты и упорядоченные скорости их центров масс. В результате такой операции, после численного решения системы уравнений Гамильтона, мы опишем полную динамику термомеханических процессов в твердых телах микро- или наноструктурного размера. Однако в работе такая процедура ни разу не проводилась.

В качестве примера используем вывод уравнения равновесия, проведенный для модельной решетки с вакансиями (стр.21). После описания базисных векторов (1.1) делается утверждение, что «Во введенном базисе любой двумерный вектор  $\vec{i}$  представляется в виде...». Далее для этого произвольного вектора вводятся разностные операторы (1.4) и выписываются «уравнения равновесия частицы  $n, m$ , имеющей  $b$  ближайших соседей» (ур. (1.5)). После проецирования этого уравнения на базисные векторы автор получает уравнения (1.6), которые описывают равновесия частиц. Недостаток изложения состоит в том, что для произвольного вектора, который никакого отношения не имел к частицам, получились уравнения равновесия этих частиц. Возникает физическая неувязка.

Особо следует отметить использование автором работы словосочетания «...точное аналитическое решение...» на протяжении всей работы. См., например, стр.11 «Получено точное аналитическое решение задачи о деформировании двумерной треугольной кристаллической решетки...». Однако, еще в 1892—1899 годах Анри Пуанкаре доказал, что существует бесконечно много частных решений для задачи, содержащий от трёх и более тел. Т.е. в общем случае отсутствует точное аналитическое решение для системы с числом частиц больше двух. Конечно, если мы накладываем специальные связи, то, как показал автор, можно найти аналитическое решение и для систем с гораздо большим числом частиц, но не атомов, на которые мы не можем наложить какие-либо связи. По этой причине лучше отказаться от такого словосочетания в работе, где планируется рассмотрение твердых тел на микро- и наноуровне.

Данные замечания не являются препятствием к вынесению положительной оценки работы в целом, которая представляет собой законченное исследование, выполненное на высоком научном уровне и которую можно квалифицировать как решение важной научной проблемы, имеющей существенное значение для развития механики деформируемого твердого тела.

### **Заключение.**


Диссертация имеет внутреннюю целостность и ясную логику, написана точным научным языком. Дается сжатый обзор состояния исследований по теме диссертации и указывается ее вклад. Выносимые на защиту новые теоретические результаты сопровождаются решением задач, демонстрирующих их существенные особенности. Автореферат полностью отражает содержание диссертации. Оформление диссертации и автореферата соответствует существующим требованиям. Недостатков, ставящих под сомнение справедливость каких-либо положений, выносимых на защиту, не обнаружено.

Диссертационная работа В.А. Кузькина «Термомеханические процессы в твердых телах с микроструктурой» вносит значительный вклад в решение крупной научной проблемы механики деформируемого твердого тела в части разработки подходов к аналитическому описанию термомеханических


процессов в кристаллических твердых телах. Диссертационная работа является завершённым научным исследованием, выполненным на высоком научно-методическом уровне, соответствует паспорту специальности 01.02.04 – «Механика деформируемого твердого тела» и имеет важное научное значение и практические приложения.

Работа отвечает всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени доктора наук в соответствии с Положением о порядке присуждения ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по указанной специальности.

Диссертационная работа была рассмотрена и одобрена на заседании общеинститутского семинара «Теоретическая и прикладная механика» Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук (протокол № 64 от 23 октября 2020г.).

Научный руководитель института  
Заведующий лабораторией «Физики быстропротекающих процессов»  
Доктор физико-математических наук  
Академик РАН, профессор  Фомин Василий Михайлович

630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, 4/1  
ИТПМ СО РАН, Тел. 8 (383) 330-85-34, [fomin@itam.nsc.ru](mailto:fomin@itam.nsc.ru)

Старший научный сотрудник  
лаборатории «Физики быстропротекающих процессов»  
кандидат физико-математических наук  
 Головнев Игорь Федорович

630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, 4/1  
ИТПМ СО РАН, Тел. 8 (383) 330 38 04, [golovnev@itam.nsc.ru](mailto:golovnev@itam.nsc.ru)

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук (ИТПМ СО РАН),  
630090, г. Новосибирск, ул. Институтская, 4/1  
8 (383) 330-42-68, [admin@itam.nsc.ru](mailto:admin@itam.nsc.ru)