

Отзыв официального оппонента
на диссертацию Кузькина Виталия Андреевича
«Термомеханические процессы в твердых телах с микроструктурой»,
представленную к защите на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук
по специальности 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела

Актуальность темы диссертационной работы. Одной из актуальных нерешенных проблем механики деформируемого твердого тела является определение связи между микроструктурой кристаллических твердых тел и их термомеханическими свойствами. Данная проблема приобрела в последние десятилетия особую важность в связи с все более широким использованием микро – и наноструктур под критическими тепловыми и механическими нагрузками. В силу особой сложности возникающих при этом задач, чаще всего используются натурные эксперименты или численное моделирование, дающие удовлетворительные ответы лишь для частных случаев. В частности, показано, что во многих материалах, включая нанопроволоки, углеродные нанотрубки, графен, кремниевые мембранны и др. наблюдаются существенные отклонения от классического закона теплопроводности Фурье. В этой связи разработка аналитических методов, учитывающих особенности деформирования на микро- иnanoуровне, приобретает особую актуальность.

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

Структура и объем диссертации. Диссертация В.А. Кузькина состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы, включающего 262 наименования. Общий объем диссертации составляет 313 страниц.

Во введении обоснована актуальность работы, раскрыты научная новизна и практическая значимость работы, а также основные положения, выносимые на защиту. Определены основные направления исследования, и приведены литературные источники, на которых базировалась работа автора. Сформулирована цель диссертационной работы – развитие подходов к аналитическому описанию термомеханических процессов в кристаллических твердых телах с использованием дискретного моделирования. В рамках этой чрезвычайно широкой темы, автор выделяет три ключевых задачи:

- Разработка подходов к описанию процессов термоупругого деформирования и волнового переноса энергии в кристаллических твердых телах на микро- и наноуровне;
- Развитие подхода к получению определяющих уравнений, описывающих термоупругое поведение кристаллических твердых тел;
- Демонстрация эффективности предлагаемых подходов в конкретных задачах.

В первой главе развит подход, позволяющий в линейном приближении упругое деформирование кристаллических твердых тел с вакансиями. Описано влияние вакансий на упругие и прочностные свойства кристаллов. Исследованы задачи с периодическим и случайным распределением вакансий в кристалле, и обнаружена возможность существенного расхождения с традиционными континуальными моделями. Обсуждается вопрос о применимости континуальных методов для описания полей перемещений, создаваемых вакансиями и для оценки влияния вакансий на эффективные упругие свойства кристаллов.

Вторая глава посвящена описанию переходных процессов в упругих твердых телах с кристаллической структурой. Выведено точное уравнение для ковариаций скоростей с детерминированными начальными условиями. решеток. Исследованы два переходных процесса: перераспределение энергии по степеням свободы и уравнивание кинетической и потенциальной энергий. Общие закономерности изучаемых переходных процессов проиллюстрированы на примерах одномерных и двумерных скалярных решеток. Полученные результаты могут быть использованы при формулировании определяющих соотношений для многокомпонентных моделей механики сплошных сред, например, для описания лазерного воздействия на деформируемое твердое тело.

Третья глава посвящена описанию переноса энергии в упругих кристаллических телах. 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. Общий подход проиллюстрирован на примерах кристаллов с простой и сложной элементарной ячейкой. Разработанный подход может быть использован 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 посвящен подходу к получению в адиабатическом приближении определяющих соотношений, связывающих давление, объем и тепловую энергию в кристаллических телах в предположении парных силовых взаимодействий. Эти соотношения позволяют рассчитывать поля термоупругих напряжений. Рассмотрены модельные системы, в том числе модели с отрицательным коэффициентом теплового расширения. 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 Заключении приведены основные результаты и выводы диссертационного исследования, выносимые на защиту.

Научную новизну диссертационной работы В.А. Кузькина «Термомеханические процессы в твердых телах с микроструктурой» представляют следующие результаты, выносимые на защиту:

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

2. Развит 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. Развит 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. Развит 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 значимость работы состоит в разработке аналитических подходов для описания термомеханических явлений в твердых телах с использованием дискретных моделей, позволяющих учесть особенностей кристаллической микроструктуры.

Практическая значимость состоит в возможности использования полученных результатов для расчета полей термоупругих напряжений и температуры в кристаллических твердых телах, при решении задач упругости и прочности материалов и конструкций на наноуровне, при построении определяющих соотношений для многокомпонентных моделей механики сплошной среды, при описании термоупругого поведения твердых тел, при описании переноса энергии в кристаллических твердых телах, при описании поведения кристаллических материалов при лазерном воздействии.

Все основные результаты диссертационной работы опубликованы в ведущих международных рецензируемых журналах, входящих в базы данных Scopus и Web of Science. Результаты докладывались соискателем на нескольких десятках международных и всероссийских научных конференций по научной специальности диссертации. Выполнение работы было поддержано грантами РФФИ и РНФ.

Замечания к содержанию работы. К работе имеются следующие вопросы и замечания:

1. В главе 1, при рассмотрении задачи о равновесии конечной решетки с вакансиями, применяется в качестве основного аналитического аппарата для решения задачи дискретное преобразование Фурье, определяемое конечными суммами (1.12) по узлам решетки от преобразуемой функции.

В результате решение определяется конечным набором значений в виде двойной конечной суммы (1.22) при некотором N . В дальнейшем автор переходит без обоснования к пределу по $N \rightarrow \infty$ для бесконечной решетки и вольно записывает решение в виде двойного интеграла (1.23), на основе которого делает ряд важных заключений о свойствах задачи. Следует отметить, что переход от конечной суммы (1.22) к двойному интегралу (1.23) в работе не обоснован, и нет ссылок на работы, где содержалось бы это обоснование. Хотя сам по себе этот переход не является тривиальной или очевидной задачей.

По поводу дискретного преобразования Фурье, используемого в главах 2-4 отметим, что в работе при обращении используется интегральная форма обратного преобразования, по видимому, как некоторая предельная форма для бесконечной решетки. Объяснений нет. Как минимум следовало бы доказать (показать, если это очевидно авторам), что такое использование обратного преобразования дает оригинал.

2. На стр 36. Говорится, что коэффициент Пуассона увеличивается с пористостью. Однако все происходит с точностью до наоборот. Для сред с полями дефектов, а пористость является именно частным случаем дефектов – дислокаций, когда свободная деформация определяется только шаровой частью тензора свободных дислокаций, и эффективные модули упругости и коэффициент Пуассона убывают. Автор мог бы в этом легко убедиться также используя известные соотношения упругости, связывающие модуль упругости с модулем сдвига, учитывая что для пористых сред модуль сдвига не меняется.

3. Не останавливаясь на существующих неточностях (скорее всего непринципиальные) отметим главное замечание по главе 1. В тексте главы 1 Нельзя согласиться с выводами главы 1. О том, что «*концентрация деформаций вблизи вакансий не может быть описана в рамках классической теории упругости*». Выводы автора являются, вероятно, поспешными. Сравнительный анализ полученного решения с известными исследованиями других авторов скорее должен был привести к выводу о том, что недостаточная точность результатов связана с упрощениями вызванными учетом только парных взаимодействий без анализа влияния дальних взаимодействий, угловых взаимодействий и пр.

Приведем и иные соображения. Легко установить соответствие между моделью среды с полем дефектов и градиентной моделью среды, учитывающей масштабные эффекты через уравнение $u_{tt} = c^2 (u_{xx} - \lambda^2 u_{xxxx})$.

Так вот, существует достаточно много известных исследований:

- Hao&Maris (PRL200,PRB2001)&Daly, et al.(PRB 2004)
- Marangat&Sharma(PRL&JMPS, 2007)

-Jakata&Every (PRB,2008), based on exp. Data of Nilsson&Nelin (PRB1972), Dolling&Waugh (in Lattice Dynamics, ed. By Wallis, 1965, основанных на аккуратном моделировании (в том числе дискретном с анализе дисперсионных соотношений) по оценке масштабного параметра в континуальной модели, т.е. по оценке роли масштаба в различных изотропных средах, которые показали что для изотропных сред масштабный параметр является чрезвычайно малым даже для материалов с длинными связями типа гелей $\lambda \approx 0.5 - 2 \text{ \AA}$. Следовательно, и поправки к классической теории для изотропных тел являются ничтожными (иная ситуация имеет место для неоднородных тел). Это объясняет почему неудачными являлись попытки уточнить напряженной напряженно- деформированное состояние в окрестности концентраторов напряжений, предпринимаемые достаточно давно с 60- годов.

Отметим, что первая глава стоит в стороне от общей канвы диссертационной работы и я искренне считаю, что и без этой главы работа соответствовала бы требованиям к диссертации на соискание ученой степени доктора наук по объему рассмотренных научных проблем.

4. Рассматривая далее работу, начиная со второй главы можно отметить, что многие соотношения, заключения и выводы даются без полных преобразований и доказательств. Таких примеров в работе много. Например, в качестве комментария к формуле (2.58) автор пишет «*подынтегральное выражение в формуле (2.58) меняет знак и осциллирует с частотой пропорциональной времени. Следовательно, второе слагаемое в (2.58) стремится к нулю*» Далее дается ссылка на то, что можно доказательство сделать с «*использованием асимптотических методов*» И первое и второе высказывание далеко не очевидны, и требует доказательства.. Этого нет в диссертации. Аналогично, на стр 82 пишется по поводу представлений (2.124)(2.125) «...на основании общих результатов, полученных в [47] можно предположить, что величина....стремится к нулю ...». Доказательств не приводится, а ссылка на асимптотические методы только усиливает неопределенность данного высказывания

Приведем ряд незначительных замечаний:

-Дисперсионные соотношения во многих случаях построены в пространстве преобразований Фурье, какой смысл и какую ценность они представляют ?

-На стр 97 без пояснений утверждается, что при моделировании поперечных колебаний решетки графена (почему графена а не просто решетки) поперечные колебания и колебания в плоскости можно рассматривать независимо, что мол нет связанности. В

действительности это далеко не так, предположение является достаточно сильным. Имеются континуальные адгезионные модели деформирования сверхтонких плоских систем, указывающие на наличие связности даже в случае линейной задачи.

-По поводу моделирования систем цепочек даже в рамках скалярных цепочек возникает вопрос зависимости решения от выбора подсистем цепочек (рис .2.11), так как даже на примере (рис 2.11) выбор подсистем цепочек не является единственным. Действительно ли это так ? Как тогда трактовать эту неединственность ?? и модель в целом ?

-Много погрешностей в тексте, некоторые из них, связаны с тем что в тексте имеются ссылки на формулы, которые используются в дальнейшем тексте и не обсуждались в тексте предыдущем: - Стр 163 – ссылка на (3.115) при том что текущие ссылки имеют номер (3.104); также см. стр 163 (ссылка на формулу (3.197), см. также стр 187 и др.

Наряду с тем, что многие из соотношений, приводимые в тексте даются без последовательного вывода и обсуждения, разрывы в логике изложения, связанные с нумерацией еще больше затрудняют ознакомление с работой.

5. Принятую в диссертации терминологию и форму представления материала можно назвать весьма оригинальной. Само по себе это затрудняет чтение, кроме того имеются нечеткости и некорректности при изложении материала. Например, на стр.45 фактически в самом начале главы 2 приводится фраза «....сила, действующая на каждую частицу, представляется в виде линейной комбинации перемещений всех частиц.»;

-Далее здесь же скалярная скорость задается как скалярная функция от вектора, что не вполне корректно.

- Здесь же - с минимальными объяснениями говорится о возможности описания уравнений движения растянутой цепочки с парными взаимодействиями соседей и пишется, что С- есть жесткость угловой пружинки (без объяснений).

-В первой части главы 2, где излагаются основные определения и основы технологии построения решения нет желаемой четкости. Решение ищется в форме гармонических колебаний и используется дискретное преобразование Фурье. При получении решения во вполне очевидной форме через сдвиг фаз « у» гармонических колебаний в отношении координаты «x» без должного обсуждения и четкой физической трактовки вводится осреднение соответствующее статистическому определению математического ожидания. Фактически, осреднение производится по характеристике сдвига фаз у. Почему? Потому что именно с этой характеристикой связаны начальные скорости, а они являются случайными характеристиками? Возможна ли другая трактовка??

Утверждение, касающееся равенства (2.36) остается недоказанным, также как и утверждение касающееся (2.39)- «выполняется почти для все k (k - волновое число)»

6. Ряд замечаний по главе 2 приводятся ниже. Важные определения, которые затем повторяются везде в работе даются на стр. 57, но снова чрезвычайно скучо, без необходимого объяснения, тем более, что используется нетривиальная техника и нетривиальная математика.

Отметим, что в диссертации почти повсеместно не приводится ссылок на соответствующую математическую фундаментальную литературу, а даются ссылки на статьи самого автора и научного консультанта. От этого может страдать достоверность.

-Например, остается принять на веру, почему начальные условия для ковариаций записываются в виде (2.54), чем это определяется. Если эти условия постулируются, то спрашивается могут ли быть сформулированы иные начальные условия и к чему они могут привести. Далее эти же условия рассматриваются в различных разделах работы без пояснения и трактовки.

-Не вполне понятно как получается третье из условий (2.57) записанное в трансформантах Фурье? Конечно можно догадаться, но следовало бы привести четкий вывод.

-Решение (2.58) ввиду его важности для дальнейшего следовало бы получить аккуратно, чтобы можно было видеть, что является параметром обратного преобразования Фурье в (2.58) (скрыто в омега) как преобразовались фундаментальные решения уравнения (2.56) после подстановки в начальные условия, записанные в трансформантах ?

-Тоже самое по поводу важного соотношения (2.60). Имеет место фраза «Подставляя параметры (2.3)» Неясно какие **параметры** (2.3) следует подставлять в (2.57) чтобы получить это равенство. Ведь (2.3). не параметры а уравнение движения.

- на стр. 84 автор пишет что вводится Гамильтониан, но Гамильтониан должен быть записан по определению через импульсы и поэтому он строится с помощью динамического Лагранжиана и с использованием преобразования Лежандра, чтобы сохранить потенциальность. Мне не удалось этого увидеть.

7. Имеются вопросы (наверное, принципиальные), касающиеся результатов, приведенных в на стр 60.

Первое, они даются почти без пояснений и чрезвычайно скучо с точки зрения доказательств и выводов.

Без обсуждений дается решение (без полного и вывода, а это надо делать в диссертации), показывающее, что имеет место монотонное затухание температуры, определенной с

использованием осреднения по статистике. Этот момент никак не обсуждается, есть только одна фраза «*кинетическая энергия совершают высокочастотные колебания, связанные с переходом части энергии в потенциальную*» Такого пояснения точно недостаточно.

Надо отметить, что исходная задача (все задачи в диссертации таковы) рассматривается как консервативная, т.е. рассматривается полностью обратимый процесс. Например, для обратимого процесса колебания осциллятора переход кинетической энергии с в потенциальную происходит без изменения амплитуды. В работе рассматривается скалярная модель решетки, в рамках линейного процесса, более того в тексте работы встречается предположение о том, что гармоники не взаимодействуют.

Так в чем причина диссипации? К сожалению, автор не дает и сравнений с результатами других авторов, хотя ссылки на подобные работы имеются. Напомню, что, например, в работе PHYSICAL REVIEW E 81, 020103 (2010) для моделирования волновых свойств температуры и верификации уравнения теплопроводности Максвелла-Каттанео с использованием дискретного молекулярного моделирования для цепочки с линейными взаимодействиями, но в уравнение движения дополнительно введены слагаемые пропорциональные скорости – т.е. введено внутреннее трение и характеристика шума, т.е. косвенно- нелинейность. В статье Wave-Relaxation Duality of Heat Propagation in Fermi-Pasta-Ulam Chains // Modern Physics Letters B. 2012. V. 26. No. 32. 1299001

для моделирования диссипативного и волнового процесса изменения температур с привлечением обобщенного уравнения Максвелла- Каттанео также используются уравнения Ленжевеновской динамики, содержащие характеристики внутреннего трения (через скорости) и шума, в предположении нелинейного взаимодействия частиц через потенциалы Ферми- Паста- Улама. Кстати в последней работе, на основе уточненного моделирования наиболее полного в настоящее время, насколько мне известно, устанавливается что термометрическая проводимость χ (теплопроводность) возрастает с увеличением длины волны по степенному закону с показателем 0.363, что визуально выглядит как почти линейная зависимость от длины фрагмента. Эти моменты частично обсуждаются в последних разделах диссертационной работы но, по моему, без ссылок на конкретные исследования других авторов

Данные в диссертации результаты выходят за рамки указанных исследований, согласованных с законами сохранения. В работе явления диссипации температурных полей, связанные напрямую с законами сохранения не объясняются и это вызывает удивление.

Таким образом, главное замечание связано с не вполне корректным или неполным описанием необратимых процессов. Недостаточно объяснений.

Эта часть работы является принципиальной - она так или иначе повторяется в диссертации в других разделах и представляет особую ценность данного исследования. К сожалению, эта часть проведенных исследований, столь скрупулезно обосновывается, что их приходится принимать на веру.

За счет чего вносится мнимая диссипация? за счет континуализации?, за счет ряда предположений, сводящихся к добавлению или отбрасыванию некоторых слагаемых при выводе уравнений движения и их факторизации, за счет использования разложений и связанных с ним дополнительных предположений? Неизвестно.

9. Весьма интересной и логичной выглядит часть, где автор пытается указать на соответствие между континуальной термоупругостью и дискретным описанием. Эта часть достаточно логична, но опять же непоследовательна. Так, уравнение первого закона термодинамики (второе уравнение (4.27)) записано не в классическом виде, а фактически с учетом уравнения баланса тепла, что в дальнейшем и дает правильный и ожидаемый результат.

-Не обсуждается второй закон термодинамики, хотя речь идет о диссипативных процессах. Далее, когда в главе 4 обсуждается нелинейный потенциал Ферми- Паста- Улама, и впервые автор оказывается на пути логического объяснения диссипации за счет учета нелинейности. Но, к сожалению, доказательства как и почти везде опущены автором. Они заменены фразой «*Подставляя начальное распределение температуры.... о вторую их формул (4.46) получим*»

Возможно специфическая математика и логика построений и очевидна для автора, но она не вполне очевидна для неподготовленного к ней читателя.

Заключение. Сделанные замечания отражают сложность проведенного исследования и не влияют на общее, несомненно, положительное впечатление от работы. Диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне и является завершённым научным исследованием, соответствует паспорту специальности 01.02.04 – «Механика деформируемого твердого тела» и имеет важное научное и практическое значение. Все результаты получены с привлечением математических методов и их достоверность не вызывает сомнений. Результаты работы способствуют развитию механики деформируемого твердого тела и ее эффективному использованию для решения актуальных

практических задач 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.

Таким образом, диссертация «Термомеханические процессы в твердых телах с микроструктурой» соответствует требованиям п. 9 положения «О порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор, Кузькин Виталий Андреевич, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела.

Официальный оппонент,
доктор технических наук, профессор,
главный научный сотрудник лаборатория неклассических моделей механики
композиционных материалов, Институт прикладной механики Российской академии наук

Лурье Сергей Альбертович

"15" декабря 2020 г.



Адрес: 125040, Москва, Ленинградский проспект д.7

Тел: +7 495 946-18-06

E-mail: iam@iam.ras.ru

Я, С.А. Лурье, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и дальнейшую обработку.

Подпись С.А. Лурье заверяю

