

В диссертационный совет Д002.075.01
при Федеральном государственном
бюджетном учреждении науки
Институт проблем машиноведения РАН

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

В последнее десятилетие акцент в развитии механики деформируемого твердого тела сместился с традиционных 3D материалов и макроскопического пространственного масштаба на низкоразмерные материалы и структуры наноскопического масштаба. Это обусловлено современными научно-технологическими достижениями, в том числе бурным развитием нанотехнологий и разработкой новых классов материалов, наноразмерный масштаб и особенности структуры которых обуславливают необычные, иногда аномальные, физико-механические свойства. К таким необычным свойствам относятся, например, отрицательные коэффициент Пуассона или коэффициент термического расширения, неклассические звуко- и теплопроводимость и т.д. В настоящее время в рамках механики сплошных сред развиты феноменологические континуальные модели, позволяющие адекватно описывать отклик подобных материалов (в том числе наnano- и микромасштабах) на механические и термические воздействия. Тем не менее, континуальный подход не дает ответов на вопросы о физических механизмах необычных проявлений коллективного поведения атомов. Такой ответ может быть дан только на основе рассмотрения динамики кристаллической решетки материала, причем при конечных температурах. Наиболее исчерпывающими подходами к описанию динамики кристаллов, очевидно, являются первопринципные квантово-механические расчеты и/или моделирование методами молекулярной динамики и Монте-Карло с применением потенциалов, полученных в рамках квантово-механических моделей. Однако подобные подходы, несмотря на бесспорные преимущества, носят частный характер и, как правило, не позволяют делать однозначные выводы об общих закономерностях поведения материалов и структур с однотипными структурными характеристиками. Кроме того, существуют хорошо известные проблемы масштабного перехода от квантовомеханического к континуальному классическому описанию материалов. В связи с этим большой интерес вызывает развитие классического подхода к описанию динамики поведения и оценке динамических механических и теплофизических характеристик дискретных систем с регулярной структурой (кристаллов и метаструктур). Использование классических моделей линейно- и нелинейно-упругого взаимодействия атомов ограничивает спектр рассматриваемых проблем, однако является адекватным и эффективным для изучения многих необычных и перспективных проявлений коллективного поведения атомов в регулярных решетках. Среди них – отрицательное термическое расширение и баллистический теплоперенос в кристаллах, аномальные

акустические свойства, обусловленные специальным распределением дефектов и т.д. Следует отметить, что классические модели решеток активно развиваются уже второе десятилетие (по крайней мере, быстрый рост количества публикаций в этом направлении начался еще в середине 2000-х годов). Тем не менее, до сих пор не разработан обобщенный математический формализм, позволяющий получать аналитические оценки и тем более осуществлять предельный (континуальный) переход и оценивать нижнюю границу масштабов применимости классических континуальных моделей.

Диссертация В.А. Кузькина направлена на заполнение этого пробела и посвящена развитию аналитических дискретных моделей механики деформируемого тела для описания термомеханических процессов в кристаллических твердых телах на наномасштабном уровне. Акцент в работе делается на анализе динамических процессов, обусловленных как колебаниями отдельных атомов, так и согласованными движениями их ансамбля, в том числе: выравнивание энергий, волновой перенос энергии, термически индуцированные объемные изменения и распространение термоупругих волн. Особую ценность работе придает проведение предельного (континуального) перехода в каждой рассматриваемой проблеме и оценка границ применимости классических континуальных моделей для описания динамики монокристаллических систем.

Сказанное выше обуславливает высокую **актуальность, научную и практическую значимость** данной диссертационной работы.

Структурно диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы, содержит достаточное для понимания количество формул и информативных иллюстраций. Список использованной литературы включает 262 источника, достаточно полно охватывающих рассматриваемую проблематику. Объем диссертации составляет 313 страниц машинописного текста.

Во Введении дается краткий обзор литературы по теме диссертации, обосновывается актуальность, научная новизна и практическая значимость работы. Формулируются цель и задачи диссертационной работы, перечислены основные публикации по теме диссертации, рекомендованные ВАК и индексируемые реферативными базами данных научных публикаций Web of Science и Scopus.

В первой главе развивается подход, позволяющий аналитически (в линейном приближении) описывать упругое деформирование кристаллов с вакансиями. Исследуется влияние вакансий на упругие и прочностные свойства кристаллов. Аналитически получены соотношения для поля перемещений в решетке с вакансиями при объемном и двухосном деформировании. Помимо аналитических методов, для исследования используется также молекулярно-динамическое моделирование (в задаче о случайному распределении вакансий). Проводится сравнение с результатами решения аналогичных задач в рамках классической линейной теории упругости. Делаются выводы о применимости континуальных методов для описания полей перемещений, создаваемых вакансиями, а также влияния вакансий на эффективные упругие свойства кристаллов.

Вторая глава посвящена описанию процессов, возникающих в кристаллических твердых телах при переходе к равновесию. В качестве модели деформируемого твердого тела используется бесконечный гармонический кристалл со сложной решеткой, элементарная ячейка которой содержит произвольное число соседей. Начальное неравновесное состояние задается с помощью случайных начальных условий (случайные

скорости атомов). Рассматриваются два процесса - перераспределение энергии по степеням свободы элементарной ячейки и колебания кинетической и потенциальной энергий. Получается точное аналитическое решение, описывающее данные переходные процессы в кристаллах с произвольной решеткой. Для примера рассматриваются переходные процессы в двухатомной цепочке, двумерной треугольной решетке, квадратной решетке и решетке графена. Численно (методом молекулярной динамики) исследуется влияние малой нелинейности потенциала межатомных взаимодействий на рассматриваемые переходные процессы. Результаты, полученные во второй главе, могут использоваться при построении новых определяющих соотношений многокомпонентных моделей механики сплошных сред в сильнонеравновесном состоянии.

В третьей главе проводится обобщение результатов второй главы на случай неоднородного начального распределения энергии в кристалле. В качестве модели деформируемого твердого тела также рассматривается бесконечный гармонический кристалл. Разрабатывается подход, позволяющий в континуальном приближении описать перенос кинетической энергии в кристалле за счет упругих волн. С использованием данного подхода выводятся точные и приближенные формулы, описывающие изменение начального распределения кинетической энергии в кристалле за счет баллистического переноса энергии. Продемонстрирован ряд особенностей баллистического переноса энергии в кристаллах. В частности, показано, что фронт энергии распространяется с постоянной конечной скоростью, равной максимальной групповой скорости. В ходе переноса энергии, соответствующие различным степеням свободы элементарной ячейки, заметно отличаются даже в случае, если в начальный момент времени они заданы равными. Кроме того, наблюдается существенная анизотропия переноса энергии. Для иллюстрации полученных общих формул решаются задачи о переносе энергии в двухатомной цепочке, скалярной квадратной решетке и решетке графена с различными начальными распределениями кинетической энергии. Большинство задач решается двумя способами: аналитически и численно (методом динамики частиц), что позволяет сделать вывод о высокой степени точности полученных приближенных формул.

Четвертая глава посвящена исследованию влияния баллистического переноса энергии на термоупругое поведение кристаллов и разработке подхода к получению определяющих соотношений. В данной главе анализируются, главным образом, одномерные модели кристаллов. В частности, исследуется термоупругое поведение цепочки Ферми-Паста-Улама (ФПУ). Выводится система уравнений полусвязанной термоупругости. Данная система решается для случая синусоидального распределения начальной температуры в цепочке. Показано, что при таких начальных условиях в ФПУ-цепочке наблюдается новое резонансное явление – баллистический резонанс. Численно демонстрируется отсутствие парадокса возвращения в цепочке при наличии конечного теплового фона. Также рассматривается термоупругое поведение квазиодномерной цепочки с парными силовыми взаимодействиями, совершающей продольные и поперечные колебания. Для данной цепочки выводятся линейные и нелинейные определяющие соотношения, связывающие тепловую энергию, тепловое давление и деформацию цепочки. Показано, в частности, что в зависимости от деформации цепочка может демонстрировать положительное и отрицательное линейное и нелинейное тепловое расширение. В частности, в нерастянутой цепочке тепловое давление пропорционально корню из тепловой энергии, что приводит к существенным отклонениям от уравнения Ми-

Грюнайзена. Результаты аналитического описания находятся в хорошем соответствии с результатами молекулярно-динамического моделирования.

В заключении приведены основные результаты и выводы диссертационного исследования, выносимые на защиту.

Все основные результаты, защищаемые положения и выводы работы являются новыми. Сформулированные в работе научные положения, выводы и рекомендации получены с использованием обобщенных аналитических моделей и методов, на основе чёткого понимания и трактовки анализируемых физических явлений. Это обеспечивает применимость полученных результатов и выводов к широкому классу кристаллических структур, в том числе содержащих регулярно и нерегулярно распределенные точечные дефекты.

Научную новизну диссертационной работы В.А. Кузькина составляют результаты, выносимые на защиту:

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

2. Развит подход к описанию в линейном приближении переходных процессов в кристаллических твердых телах с произвольной сложной решеткой. Получено точное 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. Получено обобщающее соотношение, описывающее 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.

Достоверность основных положений диссертации достигается за счет использования строгих математических подходов и методов, сравнения аналитических результатов с результатами численного моделирования и соответствием полученных решений с опубликованными результатами других авторов.

Теоретическая значимость работы состоит в разработке новых подходов для аналитического описания термомеханических процессов в твердых телах с кристаллической структурой.

Практическая значимость. Развиваемые в работе подходы могут послужить для расчета полей термоупругих напряжений и температур в кристаллических твердых телах, содержащих малое число дефектов. Подход, предложенный в первой главе, может использоваться для оценки упругих свойств и компьютерного дизайна нано- и

микромасштабных элементов структур. В частности, развитый формализм может эффективно применяться при проектировании специфической дефектной структуры, обеспечивающей способность кристаллитов функционировать в качестве акустической (аналоговой) нейронной сети. Подход, развиваемый во второй главе, может использоваться при построении определяющих соотношений для многокомпонентных моделей механики сплошной среды при описании поведения кристаллических материалов в сильно неравновесных условиях, например, при лазерном воздействии. Подход, развиваемый в третьей главе, может использоваться при описании переноса энергии случайных колебаний в кристаллических твердых телах, в том числе многокомпонентных соединениях и метаматериалах. В частности, получаемые результаты могут использоваться для моделирования баллистического переноса тепловой энергии в кристаллах и описания отвода тепла в наномасштабных элементах нано- и микроустройств. Подход, развиваемый в четвертой главе, позволяет получать новые определяющие соотношения, которые могут использоваться при описании термоупругого поведения твердых тел различной природы.

Все основные результаты диссертационной работы опубликованы в ведущих российских и международных рецензируемых журналах, входящих в базы данных Scopus или Web of Science и рекомендуемых ВАК для диссертационных работ по специальности 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела. Среди них – такие авторитетные журналы как Physical Review E, Journal of Physical Chemistry, Доклады РАН, что является убедительным подтверждением мирового уровня полученных результатов. Личный вклад автора в опубликованных работах по теме диссертации, на взгляд оппонента, является определяющим. Автореферат диссертации полностью отражает содержание диссертации, основные идеи и выводы работы. Работа прошла апробацию на большом количестве международных и всероссийских научных конференций, различных научных семинарах, а также бюро ОЭММПУ РАН. Выполнение работы было поддержано грантами РФФИ и РНФ.

Замечания к диссертационной работе:

1. Во вводных частях основных разделов диссертации проводится обзор исследований различных авторов, посвященных изучаемым аспектам поведения кристаллических материалов и структур. В то же время совершенно не упомянутым остался широкий пласт работ по механике решеток / сетей пружин (*lattice models / spring network models*). В рамках этих моделей также развито аналитическое описание и осуществляется сопоставление и переход к континууму. Хотя эти модели, как правило, применяются для описания материала на «надатомном» масштабе и для определения параметров потенциалов межчастичного взаимодействия в методах типа укрупненной молекулярной динамики, их формализм также позволяет аналитически рассматривать кристаллы и поэтому заслуживает отдельного упоминания.

2. В работе описание взаимодействия атомов/частиц ограничено парным приближением, что обосновывается приближением линейного отклика решетки и возможностью использования в этом случае линейно-разностных операторов. В то же время потенциалы взаимодействия атомов в реальных кристаллах являются многочастичными, что традиционно формулируются в терминах зависимости потенциала от локальной плотности, либо от угла между связями атома со смежными соседями. В обоих случаях также применимо линейное приближение к описанию этих вкладов в силы

взаимодействия при малых относительных смещениях атомов. Учет этих (также линейных) вкладов способен существенно изменить, динамику как быстрых, так и медленных процессов в кристалле.

3. В работе различными способами получен целый ряд вариантов соотношений, описывающих волновое распространение кинетической энергии в кристаллах, в том числе осуществлены предельные (континуальные) переходы. Эти соотношения свидетельствуют о баллистическом механизме распространения тепла в монокристаллах. В то же время не обсуждается фундаментальный вопрос о том, почему в традиционных 3D материалах данный механизм сменяется диффузионным. Является ли баллистический способ переноса особенностью низкоразмерных материалов/структур, либо нарушение «баллистичности» теплопереноса является результатом рассеяния энергии на точечных, линейных и плоских дефектах реальных дефектных (и поликристаллических) материалов?

4. Не до конца понятным оппоненту является фундаментальный вопрос о разделении автором кинетической энергии на энергию направленного движения атомов и энергию неупорядоченного движения (составно, тепловую энергию). Это актуально, в частности, для понимания, баллистический перенос какой составляющей рассматривается в Главе 3 диссертации. Хотя ковариационный подход и используемые начальные условия, очевидно, должны определять анализ именно тепловой составляющей, данный вопрос требует дополнительного прояснения. При этом возникает отдельный вопрос о распространении собственно упругих волн в линейно-упругом кристалле наряду с тепловыми волнами (или их идентичности).

5. В большинстве разделов диссертации основное внимание уделяется описанию математических моделей и выводу общих аналитических соотношений, однако анализ конкретных результатов/последствий, к которым приводят или могут приводить эти соотношения, приводятся в этих разделах реферативно и незаслуженно лаконично. В то же время сами по себе эти результаты и их следствия представляют отдельный интерес и заслуживают серьезного обсуждения и сопоставления с данными экспериментальных исследований и атомистического моделирования.

6. В названии диссертации делается акцент на микроструктуру материала, в то время как основная часть результатов посвящена бездефектным кристаллам (одно- и многокомпонентным), либо кристаллам, содержащим некоторое число точечных дефектов только одного типа (вакансий). Кроме того, термин «тела» традиционно подразумевает трехмерные объекты, в то время как большая часть работы посвящена низкоразмерным материалам.

7. В тексте диссертации местами встречаются описки, неточности в формулировках, ошибочные номера формул или указания на формулы, которые выводятся позднее, используются переменные, определения которых не приведены или приведены позже, на отдельных графиках приведены неправильные обозначения осей.

Указанные замечания в целом носят характер уточнений и пожеланий не влияют на общую положительную оценку данной работы, выполненной на мировом научном уровне.

Заключение. 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 использованием строгих

математических методов и их достоверность не вызывает сомнений. Результаты работы вносят важный вклад в развитие актуального направления механики деформируемого твердого тела – наномасштабной механики кристаллических материалов и структур – и открывают новые возможности для ее эффективного применения к решению актуальных задач прогнозирования поведения, оценки динамических свойств и дизайна атомной структуры перспективных низкоразмерных и объемных наноматериалов. 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.

Все сказанное выше позволяет сделать заключение о том, что 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 физико-математических наук,
главный научный сотрудник лаборатории
компьютерного конструирования материалов
ИФПМ СО РАН



Шилько Евгений Викторович

10 декабря 2020 г.

634055, г. Томск, пр. Академический, 2/4
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт физики прочности и материаловедения
Сибирского отделения Российской академии наук
Тел: +7 3822 28 69 71
E-mail: shilko@ispms.tsc.ru

Я, Шилько Евгений Викторович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и дальнейшую обработку.

Подпись Е.В. Шилько заверяю
Ученый секретарь ИФПМ СО РАН
К.Ф.-М.Н.



Матолыгина Н.Ю.