

В диссертационный совет Д 002.075.01
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Института проблем машиноведения Российской академии наук
199178, Санкт-Петербург, Большой пр., В.О., д. 61

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию

Сикибы Николая Васильевича

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ МОД ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ
И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ЗАРОЖДЕНИЕ И РОСТ ТРЕЩИН,

представленной на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук по специальности:

01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела

01.04.07 – Физика конденсированного состояния

В настоящее время исследование прочности и пластичности современных нанокристаллических материалов относится к активно развивавшемуся направлению мировой науки. Интерес к нанокристаллическим материалам обусловлен их уникальными физико-механическими свойствами. В частности, обычно наноматериалы проявляют высокую прочность, твердость и износостойкость. Вместе с тем, большинство наноструктурных материалов характеризуются низкой пластичностью, что сильно ограничивает круг их практического приложения. Повышение пластичности и трещиностойкости наноматериалов является важной задачей современной механики и физики твердого тела. Однако, в последние времена экспериментально выявлен ряд нанокристаллических металлов и сплавов, которые обладают одновременно высокой прочностью и функциональной пластичностью. В этих работах отмечается, что необычные свойства этих материалов связаны с реализацией специфических процессов

пластической деформации. Таким образом, развивающееся в диссертационной работе Н.В. Скибы теоретическое описание новых механизмов пластической деформации наноматериалов несомненно является актуальным и имеющим высокое значение для развития фундаментальной теории пластичности наноструктурных материалов.

В работе Н.В. Скибы используется энергетический анализ квазистатических дефектных конфигураций, который позволяет определить критические условия трансформации этих дефектных систем. В рамках этого подхода, эволюция дефектных конфигураций (дислокаций и дисклиниаций) сопровождается пластической деформацией. Пластическая деформации приводит к неоднородности нанокристаллической структуры, которая приводит к упругим искажениям кристаллической решетки. В свою очередь, эти упругие искажения выражаются в изменение упругой энергии дефектной системы, которая подвергается трансформации. В теоретических моделях, представленных в диссертации, производится расчет изменения упругой энергии различных дефектных конфигураций, состоящих из ансамблей дислокаций и дисклиниаций, а такжеnano и микротрешин. На основе этого расчета определяются критические параметры реализации этих процессов, такие как критические значения внешнего напряжения, критические размеры дефектных структур и т.д. При расчете энергетических характеристик используется математический аппарат линейной теории дефектов в упругоизотропной среде.

Диссертация состоит из введения, где поставлены цели и задачи работы, обоснована актуальность и дано краткое описание содержания диссертации, четырех оригинальных глав основного текста и заключения, в котором приводятся основные результаты работы и формулируются основные выводы.

В первой главе диссертации автор рассматривает энергетические характеристики дефектных структур, которые согласно теории дефектов и экспериментальным данным обычно возникают в нанокристаллических материалов в результате действия межзеренного скольжения. Межзеренное скольжение реализуется через скольжения так называемых зернограницевых дислокаций с векторами Бюргерса параллельными плоскости границ зерен под действием внешнего сдвигового напряжения. В представленных в этой главе трех теоретических моделях исследуется связь межзеренного скольжения с другими механизмами пластической деформации, которые выступают в роли механизмов аккомодации, сглаживая неоднородности пластической деформации, возникающие в результате действия межзеренного скольжения. В частности, проведено теоретическое описание совместного действия межзеренного скольжения и ротационной деформации, а также межзеренного скольжения и скольжения частичных и полных решеточных дислокаций, испускаемых из границ зерен и их тройных стыков. Была рассмотрена конкуренция между механизмами релаксации упругих

напряжений, создаваемых при действие межзеренного скольжения, а именно, между механизмом испускания частичных дислокаций и зарождением нанотрешин на дефектах дисклинационного типа. В третьей модели дано теоретическое объяснение необычных эффектов упрочнения и разупрочнения, которое экспериментально наблюдается в ряде нанокристаллических сплавов, проявляющих свойство сверхпластичности. В рамках произведенного теоретического расчета, была получена кривая зависимости напряжения течения от степени пластической деформации, демонстрирующая хорошее совпадение с экспериментальной кривой.

Во второй главе теоретически исследуются микромеханизмы формирования двойниковых прослоек в нанокристаллических металлах и керамиках. Диссертантом предлагается и описывается механизм зарождения одиночного нанодвойника в результате последовательного испускания частичных дислокаций (носителей деформации двойникование) из сегмента границы зерна в совместном поле сдвиговых напряжений, создаваемых внешним напряжением и дисклинационным диполем. Скольжение этих дислокаций в теле зерна вдоль параллельных плоскостей скольжения приводит к формированию достаточно толстых нанодвойниковых прослоек. Энергетический расчет изменения упругой энергии дефектной системы, характеризуемый эмиссию частичных дислокаций, позволил автору определить критические напряжения испускания частичных дислокаций, а также с помощью итерационной процедуры рассчитать положения равновесия этих дислокаций в теле зерна. На основе этого расчета были оценены размеры и форма нанодвойников, которые находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными для конкретных нанокристаллических материалов. Также в этой главе был разработан и теоретически описан новый микромеханизм формирования нанодвойников за счет последовательной реализации идеальных наноскопических сдвигов вблизи вершины трещины. Преимуществом этого механизма зарождения нанодвойников является то, что для его реализации не требуется существование соответствующих частичных дислокаций на каждой плоскости скольжения или наличия непрерывно действующих источников этих дислокаций. Однако, оценка критических напряжений действия этого механизма показала, что зарождение нанодвойников по этому механизму возможно только при очень высоких значениях сдвиговых напряжений, которые в реальных наноматериалах достижимы вблизи сильных концентраторов напряжений таких как трещины. Используя критерий энергетически выгодного роста микротрешин, автор произвел оценку влияния реализации пластической деформации вблизи вершины трещины за счет зарождения нанодвойника на трещиностойкость нанокристаллического материала. Увеличение или уменьшение трещиностойкости оценивается по изменению критического коэффициента интенсивности напряжений.

Третья глава посвящена изучению возможных механизмов релаксации напряжений несоответствия в относительно толстых нанокристаллических пленках и покрытиях. Хорошо известно, что из различия в параметрах кристаллической пленки и подложки в пленках возникают внутренние напряжения, которые зачастую вызывают деградацию функциональных физико-механических свойств этих систем. Вследствие этого задача релаксации внутренних напряжений крайне важна для практического применения современных нанокристаллических пленок и подложек. В этой главе автором разработаны две теоретические модели снижения напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях, носящие предсказательный характер. В первой модели рассматривается формирование в пленке вблизи ее поверхности специфической дефектной структуры, состоящей из ряда периодически распределенных диполей дисклиниаций несоответствия, возникающих при реализации межзеренного скольжения. Из проведенного энергетического расчета следует, что поле напряжений, создаваемое дисклиниациями несоответствия, может частично релаксировать внутренние напряжения несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях. Во второй модели применяется кинетический подход, в рамках которого рассматривается какое влияние оказывает диффузия по границам зерен на изменение напряжений несоответствия в металлических и керамических системах пленка-подложка. На основе известного выражения для скорости пластической деформации, осуществляющейся за счет диффузионного массопереноса по границам зерен, рассчитывается средняя пластическая деформация нанокристаллической пленки. Показано, что действие диффузии по границам зерен может эффективно снижать напряжения несоответствия в течении относительно коротких временных промежутков.

Наконец, в **четвертой главе** автором разработаны новые микромеханизмы зарождения наноскопических зерен и их цепочек внутри относительно больших зерен вблизи вершин трещин в нанокристаллических керамиках. Рассчитаны энергетические характеристики реализации этих механизмов пластичности и проанализировано влияние осуществления пластической деформации вблизи вершины трещины за счет образования новых наноскопических зерен и их цепочек на трещиностойкость хрупких нанокристаллических материалов. Автором показано, что зарождение новых нанозерен способно частично снижать высокие напряжения вблизи вершины трещины. Этот новый специфический механизм повышения трещиностойкости актуален в первую очередь для хрупких материалов, таких как керамики, в которых традиционные механизмы повышения трещиностойкости, такие как испускание решеточных дислокаций из носика трещины, затруднены.

Список литературы состоит из 209 наименований и списка публикаций автора по теме диссертации из 36 наименований.

Достигнута **цель исследования** - построены теоретические модели взаимодействия между различными модами пластической деформации и дана оценка трещиностойкости нанокристаллических твердых тел.

Следует отметить, что полученные автором в диссертационной работе результаты несомненно являются **новыми**. Так, например, автором впервые теоретически описан механизм вращения зерен, построены механизмы зарождения нанодвойниковых прослоек на границах зерен, объяснены необычные эффекты длительного упрочнения и разупрочнения при сверхпластической деформации в нанокристаллических материалах. Также, впервые предложены предсказательные теоретические модели релаксации напряжений несоответствия в нанокристаллических пленках и покрытиях. Наконец, впервые предложен и теоретически описан новый механизм пластической деформации за счет зарождения новых нанозерен на границах относительно больших зерен, характерный для хрупких нанокристаллических материалов. Показано, что этот механизм также может выступать, как альтернативный механизм повышения трещиностойкости нанокристаллических керамик.

Достоверность разработанных теоретических моделей подтверждается применением конкретных, хорошо развитых в теории дефектов методов расчета, а также, в большинстве рассмотренных случаев, хорошим качественным совпадением с экспериментальными данными, а в отдельных случаях количественным совпадением с экспериментальными наблюдениями аналогичных процессов в конкретных нанокристаллических материалах.

Диссертация написана четким и понятным языком и имеет большое количество иллюстраций.

Большинство полученных автором результатов представляют и практический интерес. Они могут быть использованы, как для развития общей теории пластического поведения нанокристаллических материалов, так и для практического использования при оценке свойств пластичности новых конструкционных материалов.

Автореферат в полной мере соответствует содержанию диссертации. Полученные автором результаты полностью отражены в опубликованных работах.

В диссертации Скибы Н.В. оказались затронутыми сложные проблемы физики твердого тела, физики прочности и механики деформируемого твердого тела. Поэтому естественно, что в процессе знакомства с диссертацией возникло много вопросов и замечаний. **Ниже формулируются наиболее значимые из этих замечаний:**

1. Работа в большей степени относится к проблемам физики твердого тела, физики прочности, в меньшей степени к механике разрушения, а также затрагивает проблемы механики деформируемого твердого тела. В сложных

для анализа работах такого рода важным представляется наличие четких определений. К сожалению, в диссертации отсутствует такой набор необходимых определений.

2. В работе используется единая методика анализа: на основе качественных физических рассуждений предлагаются один или несколько различных сценариев. Затем исследуется энергия системы для этих сценариев и дается вывод о реализуемости того или иного сценария, как наиболее энергетически выгодного. Определяются условия реализации сценария, как правило – критические сдвиговое напряжение. Однако при этом рассматриваются и сравниваются, очевидно, далеко не все возможные сценарии:

- например, неясно почему в разделе 1.1.1. исключаются из рассмотрения сценарии связанные с наличием скользящих дислокаций на боковых гранях (и далее на «горизонтальных» гранях зерна) скользящих дислокаций и не учитываются взаимодействия с этими дислокациями;
- на стр. 67 рассмотрен сценарий справедливый только при отсутствии на другой стороне зерна любых дислокаций.

Подобные вопросы, связанные с выборочным рассмотрением отдельных сценариев относятся ко всем разделам диссертации.

3. Многие из выводов, сделанные в диссертации не могут быть проверены, в силу того, что в диссертации соответствующие выкладки даются слишком «экономно», а важные утверждения делаются порой без должного доказательства, опираясь лишь на качественные рассуждения и графическое представления:

- например в соотношениях (1.16) и (1.17), не расшифровываются напряжения в выражении (1.16);
- на стр. 44 (первый абзац раздела 1.2.1 утверждается о максимальности растягивающих напряжений, создаваемых дисклинационным диполем, ссылаясь не на конкретные выражения, а на рисунок 1.7.д;
- на стр. 53 пишется «...дислокация, не способная скользить ни в одной из смежных межзеренных границ (Рис. 1.11б). Тройной стык, в свою очередь, с течением времени перемещается на малое расстояние под действием термодинамической силы натяжения межзеренных границ». Других обоснований не приводится;
- на стр. 61 см. также формулы (1.68)-1.70) не дается анализа формулы и роли подгоночного параметра;
- на стр. 67 говорится « как частичных, так и полных дислокаций оказывается энергетически невыгодным» в то время как раньше не было дано выделения полных или частичных решетчатых дислокаций;
- на стр. 69 утверждается «Уход первой -дислокации позволяет испустить очередную решеточную дислокацию. При этом вторая ... Испускание следующей решеточной дислокации опять оказывается энергетически невыгодным. Эти рассуждения не сопровождаются анализом энергетической выгодности, а носят лишь качественный характер;

- на стр. 73 хотелось бы видеть анализ зависимости напряжений (1.97) от параметров. Хотя бы на качественном уровне. Дальнейший анализ течения от общей пластической деформации не проясняет дела. Более того, непонятно как получены эти обобщенные определяющие соотношения на основе (1.97);

- непонятно откуда следуют выводы, сделанные на стр. 76 «В рассмотренной модели вклад в полную деформацию от зернограничного скольжения составлял 0.7ε , а от решеточного скольжения $-0.2 \cdot \varepsilon t$ при начальном угле раствора тройного стыка $\alpha = 160^\circ$ ». В работе рецензент не нашел соотношений, которые могли бы подтверждать эти выводы и нет алгоритма получения таких соотношений.

4. В диссертации нет обоснований возможности использования аппарата механики разрушения к масштабам, рассматриваемым в диссертации (разделы 2.1. и 2.2.). Скорее всего это трудно обосновать в рамках классической механики разрушения, так как область справедливости асимптотики классической механики разрушения равна порядка $\sim (\frac{K_{IC}}{\sigma_C})^2$, и

даже если положить что предельные напряжения $\sigma_C \approx E/10$, E -модуль упругости, то диаметр области порядка микронов или десятков (сотен) микронов.

5. Предположения, сделанные в тексте при качественном описании модели зарождения дисклинационных диполей в системе пленка/подложка, имеют внутренние противоречия: с одной стороны при описании порядка несоответствия учитывается наличие подложки, а с другой стороны «в модели не учитывается различие в упругих модулях пленки и подложки, поскольку рассматриваемая дефектная конфигурация формируется в пленке достаточно далеко от границы раздела между пленкой и подложкой».

Более того в дальнейшем обсуждается возможность достижении дислокацией границы раздела.

6. К сожалению, при обсуждении релаксации напряжений несоответствия путем зернограничной диффузии в нанокристаллических пленках автор ограничивается главным образом качественным анализом - не приводится хотя бы оценочного анализа напряженного состояния гетерогенной нанокристаллической структуры полученного с помощью методов механики деформируемых сред, описание зернограничной диффузии дается весьма скучно и на вполне последовательно (см. например (3.8) и далее, ограничиваясь, как правило, соотношениями взятыми из публикаций). Наряду с отсутствием соответствующих определений это затрудняет знакомство с диссертацией.

7. В основном качественные рассуждения лежат в основе построения моделей образования нанозерна вблизи вершины трещины в нанокристаллических твердых телах (глава 4). Здесь, скорее всего, чтобы уйти от некорректности, связанной с трещинами и областью достижения

асимптотикой предельных напряжений достаточно было бы вводить некий формальный концентратор напряжений.

8. В работе не делается оценки влияния структуры рассматриваемой системы нанокристаллической системы на уровни напряжений методами механики деформируемых сред в окрестности границ зерен, хотя бы для сравнительного анализа возможных достигнутых уровней напряжений при нагружении нанокристаллической системы со значениями критических напряжений, найденных в результате проведенного анализа.

9. Модели, рассматриваемые в диссертации основаны на том приближении, что система зерен в окрестности рассматриваемого отдельного зерна фактически является замороженной. Это, вообще говоря, является справедливым вероятно только вблизи предела текучести, т.е. для малых степеней деформаций. В этом отношении более корректными являются подходы, основанные на анализе эволюции деформации.

Для больших значений пластических деформаций, скорее всего, в дислокационном ансамбле появляются коллективные эффекты, зависящие от внешнего напряжения и от изменения конфигурации окружающих элементов системы. Развитие коллективных мод движения в ансамбле сильновзаимодействующих дислокаций получило название мезодефектов (см. например. Рыбин В.В. // Вопросы Материаловедения, 2002, N4(32), с.11-33.). Эволюция мезодефектов является эволюцией структур деформационного происхождения.

В работе же рассматриваются лишь последовательности единичных актов.

В диссертации не обсуждается иной подход. Желательно бы уточнить возможности предлагаемой в работе методики оценки свойств пластичности и прочности наноструктур с указанных позиций. Нет также и ссылок на авторов подобных исследований.

10. Неожиданным оказалось отсутствие в работе каких-либо упоминаний об эффектах Холла -Петча и о размерных эффектах в наноструктурах, приводящих к отклонению от этого закона.

11. В работе в различных ее частях упоминается о термодинамическом анализе, важности влияния температуры и пр. Однако в диссертации термодинамический анализ, который бы учитывал и влияние температур и связанные динамические эффекты отсутствует. Автор ограничивается, по существу, только квазистатическим анализом энергий рассматриваемых сценариев.

Несмотря на приведенные замечания, выполненная Н.В. Скибой диссертационная работа, несомненно, является самостоятельным законченным научным исследованием, затрагивающим новые и актуальные проблемы прочности и пластичности современных нанокристаллических материалов. Работа выполнена на высоком научном уровне, автором проявлено знание многих аспектов современных теоретических подходов изучения пластического поведения наноструктурных материалов.

Диссертационная работа Скибы Н. В. представляет собой исследование, посвященное решению актуальной проблемы, апробирована на уровне международных научных конференций и симпозиумов. Она является законченной научно-квалификационной работой, соответствующей всем требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 года, а ее автор Скиба Николай Васильевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальностям 01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела и 01.04.07-Физика конденсированного состояния

Официальный оппонент,

доктор технических наук, профессор,

заведующий лабораторией «Неклассические

модели механики композиционных материалов и конструкций»

Федерального государственного бюджетного

Учреждения науки Института прикладной

механики РАН



С.А.Лурье

01.09.2014г.

125040, г. Москва, Ленинградский пр. 7, стр. 1

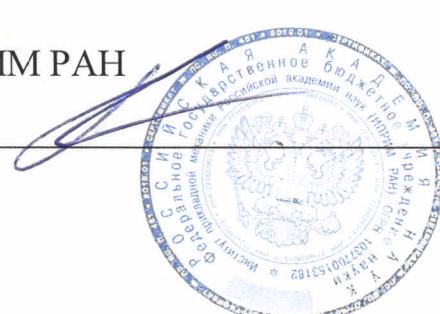
Телефон: +7(495)9461806, +7(499)1356190

E-mail: lurie@ccas.ru

Подпись профессора Лурье С.А. удостоверяю

Ученый секретарь ИПРИМ РАН

К.ф.-м.н.



Ю.К. Левин

