ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Н.В. Скибы «Взаимодействие мод пластической деформации и их влияние на зарождение и рост трещин в нанокристаллических твердых телах», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальностям 01.02.04 - механика твердого тела и 01.04.07 - физика конденсированного состояния.

Современные методы теоретического анализа прочности широкого круга перспективных для приложений нанокристаллических материалов (металлов, керамик, минералов и т.д.) базируются на нескольких теоретических подходах, позволяющих исследовать эту прочность на различных масштабных уровнях: от молекулярного до макроскопического. Так, в рамках *физики прочности и пластичности кристаллов* широко используются методы молекулярно-динамического и дискретно-дислокационного (компьютерного) моделирования процессов образования решеточных дефектов (дислокаций, вакансий и др.), а также их взаимодействие друг с другом - наряду с традиционным дислокационно-кинетическим методом. В основе последнего лежит формулирование и решение кинетического уравнения (уравнений) для плотности дислокаций в деформируемом материале. Уравнения включают в себя элементарные процессы генерирования, размножения, аннигиляции и диффузии дислокаций, что позволяет анализировать образование и эволюцию в материале различных дислокационных структур на мезоскопическом уровне с учетом структурных факторов.

В рамках *механики деформируемого твердого тела* прочность и пластичность кристаллических тел рассматривается и анализируется как микромеханика упруго взаимодействующих друг с другом дислокаций, а также их особых образований: дисклинаций, дисклинационных диполей и квадруполей. Анализ базируется на континуальной теории дефектов и классической теории упругости. По своему теоретическому подходу и результатам анализа диссертация Н.В. Скибы стоит ближе ко второй группе методов. В ней используется разработанный в 70-80 гг. прошлого века в ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН метод анализа энергетической устойчивости различных статических и квазистатических дислокационных структур с целью установления критических параметров, от которых зависит устойчивость этих структур и направление их развития. В диссертации Н.В. Скибы этот энергетический подход применяется для анализа характерных для нанокристаллических материалов дислокационных структур и процессов (по терминологии диссертанта – мод пластической деформации), таких как зернограничное скольжение, вращение зерен, образование нанозерен и нанодвойников, а также для анализа влияния указанных процессов на формирование и рост микротрещин.

<u>В кратком изложении основное содержание и результаты диссертационной работы Н.В. Скибы состоят в следующем.</u>

В <u>первой главе</u> обсуждается взаимодействие механизмов зернограничного скольжения и вращения зерен, явлений, характерных для пластической и сверхпластической деформации нанокристаллических и мелкозернистых материалов. Скольжение по границам зерен сопровождается образованием разностных дислокаций и дисклинаций на тройных стыках границ как на эффективных стопорах, препятствующих перемещению зернограничных дислокаций и способствующих росту локальных напряжений. В отсутствие дополнительных деформационных процессов, таких как эмиссия решеточных дислокаций из границ и вращение зерен, это может инициировать зарождение нано- и микротрещин в деформируемых материалах.

Количественный анализ взаимодействия механизмов зернограничного скольжения, вращения зерен и расщепления дислокаций на тройном стыке проведен в двумерном при-

ближении в предположении, что получаемые результаты сохранят наиболее существенные моменты более полной трехмерной, объемной картины явления. Расчет в рамках энергетического подхода основывается на разнице (балансе) энергий исходного состояния системы скользящих и переползающих зернограничных дислокаций и энергий новообразованных дефектов после расщепления дислокаций на тройном стыке и образования стыковых дисклинаций и дисклинационных диполей, вызывающих вращение зерен. Расчет энергий включает в себя собственные энергии дефектов и энергии их взаимодействия друг с другом в исходном и новом их состоянии, а также работу, совершаемую приложенным к материалу напряжением. Для этого используются формулы и соотношения континуальной теории дефектов и теории упругости изотропного твердого тела.

Энергетическая выгодность состояния вновь образованных дефектов определяет величину критического напряжения для достижения этого состояния и его зависимость от размера зерен и угла раствора тройного стыка. Найдено, что критическое напряжения сильно возрастает при углах раствора меньше 90^0 и незначительно при углах больше 90^0. Расчет показывает, что с уменьшением размера нанозерен критическое напряжение снижается и тем сильнее, чем меньше асимметрия зерна (его продолговатость). В последующих разделах первой главы сделан расчет энергетической выгодности испускания частичных дислокаций из границ нанозерен в хрупких материалах (керамиках) по сравнению с зарождением в них микротрещин, и определены области параметров (размеров зерен и углов раствора), где эта выгодность доминирует.

Вторая глава посвящена расчету зарождения деформационных нанодвойников вблизи диполей зернограничных дисклинаций и микротрещин путем последовательной эмиссии из границ зерен частичных (двойникующих) дислокаций Шокли и кооперативного их движения по соседним плоскостям скольжения. Расчет для нанокристалических образцов Al и Cu показал, что равновесные размеры (длина и ширина) двойников в зависимости от металла, мощности и ориентации зернограничных дисклинационных диполей варьируются от 5 до 30 нм, а критические напряжения их зарождения - от 0.2 до 2 ГПа. При расчете эмиссии двойникующих дислокаций из границы зерен вблизи микротрещины найдено, что в нанокристаллических Al и керамике 3C-SiC критическое напряжение зарождения двойникующей дислокации зависит от соотношения длины трещины к размеру зерен и увеличивается со снижением этого соотношения. В последующих разделах второй главы рассмотрено влияние образования нанодвойника как целого и связанного с ним квадруполя дисклинаций на коэффициент интенсивности напряжений и трещиностойкойкость нанокристаллического материала. Расчет показал, что коэффициент интенсивности напряжений для нормальных напряжений в устье трещины снижается, а трещиностойкость материала возрастает с ростом толщины двойника и уменьшением размера зерен.

В третьей главе приведены результаты энергетического расчета параметров диполей клиновых дисклинаций, возникающих в нанокристаллических пленках и покрытиях вследствие образования дислокаций несоответствия из-за несовместности параметров решеток пленки и подложки. Расчет показал, что равновесные значения плеча диполей зависят от несовместности параметров решеток, расстояния диполей от свободной поверхности пленки, угла ориентации диполя относительно этой поверхности и угловой мощности дисклинаций диполя. В заключение главы в рамках вакансионного механизма зернограничной диффузии Кобла количественно проанализирован процесс релаксации напряжений несоответствия на примере металлических пар покрытие-подложка Ni/Cu и Cu/Ag.

В четвертой главе рассмотрено характерное для некоторых прочных (например, Co) нанокристаллических материалов явление бездиффузионной миграции границ зерен путем образования мелких, наноскопического размера субзерен вблизи тройных стыков и границ исходных до деформации нанозерен, и его влияние на релаксацию напряжений у кончиков микротрещин и трещиностойкость материала. Зарождение субзерен в двумерном приближении осуществляется путем расщепления части исходной границы нанозерна

на две границы, а рост субзерен - путем пластического движения и расширения новых границ в теле исходного зерна. Ввиду затрудненности решеточного скольжения (например, наличия рельефа Пайерлса) вблизи углов растущих субзерен возникают локальные напряжения в виде квадруполя угловых дисклинаций. Энергетический баланс включает собственную энергию диполей дисклинаций, энергию их взаимодействия и энергию образования новых границ в поле внешнего и локального напряжений относительно энергии границ исходного нанозерна. Количественный расчет на примере керамики α-Al_2O_3 показал, что в пределах умеренных мощностей угловых дисклинаций 2-14^0 возможно существование субзерен с равновесными значениями их размеров (длины и ширины в двумерном приближении). Найдено, что образование субзерен, а также их цепочек вдоль нанозерен ных границ способствует увеличению критических длин микротрещин и, следовательно, росту трещиностойкости материала.

Подводя итог диссертационной работы Н.В. Скибы в целом, следует сказать, что в ней в рамках единого теоретического подхода, систематически и на высоком научном уровне исследована большая группа явлений, характерных для пластической деформации и разрушения нанокристаллических материалов, развивающихся по сходному сценарию. Его определяют дальнодействующее взаимодействие элементов среды и разнообразный по физико-механическому содержанию характер протекающих в ней дислокационных процессов.

Критическое замечание касается результатов расчета, представленного в виде диаграммы деформации нанокристаллического Al-Mg-Li сплава на рис. 1.15 диссертации. Эксперименты показывают (см. рис. 1.10 на стр. 48), что напряжение течение этого сплава и других нанокристаллических сплавов существенным образом зависит от скорости деформации. Именно, эта зависимость определяет их сверхпластические свойства. В рамках используемого в диссертации энергетического квазистатического анализа дислокационных процессов на наноскопическом уровне получить эти скоростные макрозависимости в принципе невозможно. Указанные зависимости отражают усредненный процесс совокупного действия и взаимодействия рассмотренных и не рассмотренных в диссертации дислокационных процессов.

В заключение отметим, что диссертация написана физически ясным языком и свидетельствует о широкой эрудиции автора и владении им современным арсеналом теоретических и аналитических средств в исследуемой им области. Обзор и список цитированной литературы достаточно полно отражают состояние вопроса на момент написания работы. Автореферат диссертации соответствует ее содержанию.

Считаю, что работа В.Р. Скибы отвечает требованиям, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальностям 01.02.04 - механика твердого тела и 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент
ведущий научный сотрудник
ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН
доктор физ.-мат. наук Г.А. Малыгин

Ученый секретарь
Отделения физики твердого тела
ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН
доктор физ.-мат. наук А.Н. Резницкий