

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию

Каминского Петра Петровича «Необратимая деформация кристаллов как структурное превращение, инициируемое изменением межатомного взаимодействия», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Актуальность темы диссертации

Одно из основных направлений физики конденсированного состояния связано с теоретическими исследованиями свойств кристаллических твердых тел, подверженных пластической деформации. В основе большинства теоретических подходов, объясняющих особенности поведения кристаллов при неупругой необратимой деформации, лежат представления о дефектах в трансляционно-инвариантной кристаллической решетке. С помощью этих подходов удалось описать многие свойства кристаллических твердых тел. Однако, задача зарождения дефектов в идеальных кристаллах пока своего полного решения не нашла. Также не удалось объяснить до сих пор природу электропластического эффекта, который заключается в резком снижении сопротивления проводника деформированию при пропускании по нему импульсов электрического тока. Диссертационное исследование Каминского П.П. как раз и посвящено развитию новых представлений о физике процессов, протекающих в кристалле при его деформации. С помощью этих представлений получены ответы на вышеназванные и другие сложные вопросы, связанные с объяснением особенностей поведения пластически деформированных твердых тел. В связи с этими факторами диссертация Каминского П.П. безусловно обладает новизной и актуальностью.

Диссертационная работа состоит из введения, пяти разделов, выводов и списка цитируемой литературы из 335 наименований. Содержит 243 страницы, 52 рисунка и 2 таблицы. Для достижения поставленной в диссертации цели, связанной с развитием новых представлений о физике процессов на стадии неупругой деформации, сформулированы пять задач, которые были успешно решены диссертантом с использованием методов функционала электронной плотности и фазового кристаллического поля, а также теории систем, далеких от состояния равновесия.

В первом разделе излагаются основные положения теоретического подхода, который затем используется для описания основных закономерностей пластически деформированных кристаллических твердых тел. В рассматриваемой работе учтено, что кристалл при деформации

представляет неизолированную систему, при описании которой необходимо учитывать все возможные структурные состояния и соответствующие им энергетические уровни. Кроме того, учитываются динамические неупругие смещения атомов кристаллической решетки, появление которых связано с изменением межатомного взаимодействия при электронных переходах Ландау-Зинера в окрестностях точек пересечения энергетических уровней. Это приводит к изменению структурного состояния кристалла без преодоления потенциального барьера между различными его состояниями. Вероятность появления динамических смещений в отличие от термически активируемых смещений практически не зависит от температуры.

В этом же разделе работы в рамках интегральной формулировки метода функционала электронной плотности предложена оригинальная методика расчета полуэмпирических функционалов, описывающих взаимодействие остовных и валентных электронов в идеальных металлах и сплавах на их основе. Для подтверждения корректности предложенной модели сил связи были рассчитаны ряд термодинамических характеристик (энергии смещения, равновесный объем, величина перенесенного заряда электронов от атомов одного типа к другому, уравнения состояния $p(V)$) сплавов на основе простых, 3d-переходных и благородных металлов. Также была предложена методика построения многочастичных потенциалов межатомного взаимодействия, пригодных для микроскопического описания динамики атомов в неидеальных кристаллах.

Во втором разделе рассматривается неупругая обратимая деформация кристалла без дефектов, связанная с появлением динамических смещений атомов. Изменение структуры кристалла при таких смещениях характеризуется скалярным параметром порядка q , определяющем амплитуду неустойчивой моды. Зависимость q от времени деформации кристалла является решением нелинейного дифференциального уравнения, полученного с использованием разложения Гинзбурга-Ландау для неравновесного термодинамического потенциала. В этом случае, в кристаллах, в которых дефекты по каким-либо причинам двигаться не могут, либо отсутствуют совсем, появление динамических смещений является единственным механизмом неупругой деформации.

Третий раздел посвящен изучению влияния динамических смещений атомов на зарождение и развитие термически активируемых смещений и связанных с ними необратимых изменений структуры кристалла, которые также характеризуются одним скалярным параметром порядка p . Взаимное влияние динамических и термически активируемых смещений в связанной системе уравнений для параметров порядка учитывается членами,

содержащими произведения параметров порядка p и q . При этом предполагается, что динамические смещения стимулируют возбуждение термически активируемых смещений. С физической точки зрения это объясняется тем, что пластическая деформация всегда развивается на стадии завершения неупругой обратимой деформации. В этом же разделе диссертации предложен механизм зарождения микротрещины в бездефектном кристалле, который не требует введения предположения о наличии каких-либо концентраторов напряжений. Также в работе исследована роль свободной поверхности в зарождении неупругой деформации. Показано, что смещения атомов в поверхностном слое кристалла приводят к появлению локализованных динамических смещений с амплитудой, превышающей критическое значение величины параметра порядка для возбуждения автосолитонов в объеме материала.

В четвертом разделе в рамках предложенного подхода рассматриваются макроскопические пространственно-временные структуры, формирующиеся в многоуровневых средах при деформации. Показано, что структурные изменения на нижележащих масштабных/структурных уровнях (с меньшими характерными временами и размерами структурных элементов) приводят к потере устойчивости структур на вышележащих уровнях (с большими характерными временами и размерами структурных элементов). Система связанных уравнений для параметров порядка сведена к двум уравнениям. Решениям этих уравнений могут быть сопоставлены экспериментально наблюдаемые бегущие полосы и системы полос, неподвижные полосы локализованной деформации на стадиях легкого скольжения, линейного упрочнения и параболического упрочнения, соответственно.

Пятый раздел посвящен исследованию влияния электрического поля на процесс неупругой деформации, обусловленной появлением динамических и термически активируемых смещений атомов. В работе рассмотрены два случая, а именно: исследовано влияние импульсного электрического тока на пластическую деформацию металлического проводника и влияние поверхностного электрического заряда на ползучесть проводника. В данной работе предлагается механизм электропластического эффекта, связанный с расщеплением энергетических уровней кристалла при поляризации среды (квадратичный эффект Штарка). Если проводник заряжен, то эффект проявляется при наличии двойного слоя на его поверхности.

В разделе **«Заключение»** сформулированы основные результаты и выводы, полученные в диссертационной работе.

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации.

Защищаемые положения, выводы и рекомендации диссертации являются обоснованными и вытекают из полученных в работе теоретических данных. Достоверность полученных в работе результатов обеспечивается корректной постановкой задач, использованием современных теоретических методов исследования характеристик твердых тел, детальным анализом полученных результатов в сопоставлении с расчетными данными других исследователей, а также имеющимися экспериментальными данными. Результаты исследования прошли необходимую апробацию на конференциях и семинарах. Все основные результаты работы опубликованы в 27 статьях в научных журналах, включенных в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени доктора и кандидата наук (из них 7 статей в зарубежных научных изданиях, индексируемых в Web of Science или Scopus, и 7 статей в российских научных журналах, переводные версии которых индексируются в Web of Science или Scopus), а также в 1 статье в специальном выпуске научного журнала и 1 коллективной монографии (на русском и английском языках).

Автореферат в полной мере отражает положения, выносимые на защиту, и соответствует содержанию диссертационной работы.

Научная новизна:

1. Новые представления о неупругой деформации кристалла. В рамках этих представлений неупругая деформация кристалла реализуется за счет двух типов смещений атомов:
 - динамических неупругих смещений, которые связываются с квантовым эффектом Ландау-Зинера. В этом случае переход от упругой деформации кристалла к неупругой не зависит от температуры и может происходить при напряжениях, меньших теоретической прочности кристалла.
 - термически активируемых смещений, которые возбуждаются в кристалле под действием внешней силы и тепловых флуктуаций.
2. Предложен метод параметризованных функционалов электронной плотности, позволяющий рассчитывать термодинамические характеристики фаз со сложными кристаллическими структурами, их фононные спектры, ударные адиабаты, а также характеристики сплавов с различными дефектами.
3. Предложена система двух нелинейных дифференциальных уравнений параболического типа для параметров порядка и получены ее возможные решения в одномерном случае, позволяющие описать зарождение неупругой деформации кристаллов.

4. Предложен новый механизм зарождения микротрещин в бездефектных кристаллах, основанный на учете появления динамических смещений атомов.
5. Объяснение электропластического эффекта, основанное на учете расщепления энергетических уровней деформируемого кристалла в электрическом поле за счет квадратичного эффекта Штарка.

Научная ценность результатов диссертации.

Диссертационная работа Каминского П.П. является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на высоком научном уровне, в которой решена проблема необратимых структурных превращений в кристаллах при деформации и наличии электрических полей.

Практическая значимость полученных в работе результатов обусловлена возможностью применения полученных знаний о физических механизмах зарождения и развития локализованной необратимой деформации, в том числе в электрических полях, роли поверхности в этих процессах при разработке технологических процессов модификации поверхности, а также при выборе параметров электрического тока при обработке материалов. Результаты диссертационной работы могут представлять интерес для специалистов, работающих в области физики конденсированного состояния, физического материаловедения, а также могут быть использованы в фундаментальных и поисковых научных исследованиях, ведущихся в отраслевых и академических НИИ, университетах.

По диссертационной работе можно сделать следующие **замечания**:

1. В первом разделе предложена методика расчета структурно-зависящих энергий межатомного взаимодействия. Но в последующих разделах эти результаты для расчета характеристик конкретных кристаллов при деформации не используются.

2. Линейный анализ нелинейных уравнений представляет стандартную процедуру. Тем не менее, в разделе 3 следовало бы привести промежуточные результаты такого анализа, что облегчило бы чтение данного раздела.

3. Во всех разделах рассматриваются только одномерные решения полученных уравнений. Двумерные решения не приводятся.

Сделанные замечания не снижают общую положительную оценку диссертационной работы Каминского П.П. и не оказывают влияния на положения, выносимые на защиту.

Содержание диссертационной работы соответствует паспорту специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, физико-математические науки по области исследования «Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их

сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и в том числе материалов световодов как в твердом, так и аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления» (п. 1 паспорта специальности).

Заключение.

По актуальности, новизне, научной ценности и практической значимости, обоснованности положений и выводов диссертационная работа «Необратимая деформация кристаллов как структурное превращение, инициируемое изменением межатомного взаимодействия», удовлетворяет требованиям п. II.9-14 Положения о присуждении ученых степеней, а ее автор, Каминский Петр Петрович, заслуживает присуждение ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Отзыв составил официальный оппонент
доктор физико-математических наук, профессор,
заведующий кафедрой высшей математики
Федерального государственного автономного
образовательного учреждения высшего образования
«Национальный исследовательский Томский политехнический
университет»,

 _____ Константин Петрович Арефьев

Дата...07.10.2015

.....

ФГАОУВО «Национальный исследовательский
Томский политехнический университет»

634050, Томск, пр. Ленина, д. 30

8 (3822) 56-35-93, E-mail: kpa@tpu.ru

Шифр специальности: 01.04.07. – физика конденсированного состояния

Подлинность подписи Арефьева К.П. подтверждаю

Учёный секретарь Учёного совета НИ ТПУ

07.10.2015



 **О.А. Ананьева**