

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу 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.

Предметом исследования является уникальный механизм переноса импульса и необратимой деформации, каким является пластическое деформирование, особенностями которого являются разнообразие необратимых изменений структуры, зависящих от исходного состояния материала, и обусловленных длинно-корреляционными многомасштабными взаимодействиями в ансамбле дефектов, характерными для неравновесных критических систем. До настоящего времени открытыми являются следующие вопросы, связанные с объяснением механизмов развития пластического деформирования:

- объяснение процессов, протекающих на стадии неупругой обратимой деформации, предшествующей стадии необратимой деформации;
- объяснение механизмов зарождения носителей пластической деформации и разрушения в идеальных (бездефектных) кристаллах;
- объяснение механизмов формирования многоуровневых пространственно-временных структур в деформируемых средах и их роль в эффектах пластической деформации, индуцированных импульсным электрическим полем.

Обсуждение основных перспективных подходов для описания необратимой деформации кристаллов и учитывающих роль дефектов кристаллической решетки, представления теории механического поля, результаты электронной теории твердого поля и методы моделирования на атомном уровне, представления о развитии пластической деформации и разрушения как неравновесных структурных превращениях позволило обосновать цель темы

диссертации - разработка новых представлений о необратимой деформации кристалла, в том числе кристалла находящегося в электрическом поле, как структурном превращении, стимулированном изменением межатомных взаимодействий.

Это позволило сформулировать актуальные научные задачи, посвященные:

- обоснованию представлений о неупругой деформации кристалла как системы, находящейся в смешанном состоянии, как структурном превращении, инициированном изменением межатомных взаимодействий при электронных переходах Ландау-Зинера между энергетическими уровнями;

- обоснованию метода многочастичных межатомных потенциалов взаимодействия, зависящих от взаимного расположения атомов и распределения электронной плотности в сплавах для расчета полной энергии кристаллов с дефектами;

- обоснованию нелинейных уравнений кинетики зарождения и развития неупругой обратимой деформации на наномасштабном уровне, условия и механизмы зарождения однородной и локализованной необратимой деформации;

- обоснованию и исследованию механизмов зарождения и развития необратимой деформации кристалла на мезо- и макроскопическом уровнях, включая формирование многоуровневых пространственно-временных структур в деформируемом кристалле, исследовать механизмы зарождения и развития макроскопической пластической деформации на стадиях легкого скольжения, линейного и параболического упрочнения;

- обоснованию механизма влияния импульсного электрического тока на снижение деформирующего напряжения (электропластического эффекта) и постоянного электрического потенциала на переход от упругой деформации к пластической.

Цель диссертации - разработка новых представлений о необратимой деформации кристалла, в том числе кристалла находящегося в электрическом поле, как структурном превращении, стимулированном изменением

межатомных взаимодействий, соответствует актуальному направлению фундаментальных исследований, обусловленных также рядом приложений.

Одними из наиболее важных приложений, имеющих отношение к исследуемым в диссертации механизмам развития неупругости и пластического деформирования, являются объяснение закономерностей выделения и релаксации упругого предвестника при формировании упруго-пластических волновых фронтов и индуцированные воздействием импульсного электрического тока механизмы пластичности.

Актуальной, наряду с развитием новых представлений о физике процессов, протекающих в кристалле при его деформации, является также задача выяснение причин ограниченности существующих подходов. Решению совокупности поставленных задач посвящена диссертационная работа П.П.Каминского.

Диссертационная работа состоит из введения, 5 разделов, заключения, изложена на 243 страницах, содержит 52 рисунка, 2 таблицы и список цитированной литературы из 335 наименований.

В первом разделе диссертации проведен анализ основных подходов, применяемых для описания необратимой деформации кристаллов (роль дефектов кристаллической решетки, представления теории механического поля, результаты электронной теории твердого поля и методы моделирования на атомном уровне, представления о развитии пластической деформации и разрушения как неравновесных структурных превращениях) и обсуждаются две основные причины, ограничивающие объяснение и описание механизмов неупругой деформации:

- предположения об изолированности кристалла, который является «открытой неравновесной термодинамической системой» в процессе деформирования;
- приближение «адиабатичности», которое противоречит нелинейной динамике поведения атомной системы в условиях межатомного взаимодействия при электронных переходах Ландау-Зинера в окрестности точек пересечения энергетических уровней кристалла при деформации. Причина нарушения

адиабатичности может быть связана с резким возрастанием времен релаксации в окрестности точек перехода и приближения последних к нано- и мезоскопическим временам, характерным для развития неупругой и пластической деформации кристалла. Отмечается роль динамических смещений, формирующих «потенциальный рельеф» для термически активируемых смещений атомов. Этот результат является новым, лежит в основе развиваемых представлений и является методологической основой для расчета микроскопического предела пропорциональности кристаллов с использованием теории функционала плотности, обоснования оригинальной методики расчета энергий межатомных взаимодействий в системах с пониженной симметрией.

Второй раздел является ключевым в методологическом отношении и посвящен исследованию переходов от упругой к неупругой обратимой деформации как структурного превращения, инициированного изменением межатомного взаимодействия. Распределение атомов в области неупругой обратимой деформации описывается атомной функцией плотности, позволяющей найти локальное значение неупругой обратимой деформации кристалла, исследовать ее поведение в окрестности порога устойчивости, ввести определение «параметра порядка» и обосновать вид эволюционного уравнения, учитывающего «метастабильность» неравновесных деформационных состояний. Определены параметры эволюционного уравнения, имеющие смысл характерного времени возбуждения динамических смещений и характерного размера неоднородностей параметра порядка. Отмечается, что характерные времена динамических смещений не зависят от обычной температуры, что связывается с динамикой взаимодействующих коллективных мод смещений и подтверждается анализом стационарных однородных решений эволюционного уравнения и их устойчивости, которые имеют природу «волн переключения» или «волн заселения». Показано, что механизм неупругой обратимой деформации, обусловленный возбуждением динамических смещений и обнаруживающий независимость от температуры,

связан с «конфигурационными» эффектами в электронной подсистеме в условиях деформации, когда переходы между энергетическими уровнями кристалла определяется только их расположением друг относительно друга. Отмечается также, что сценарии деформирования в условиях, когда дефекты по каким-либо причинам двигаться не могут (например, при интенсивных ударно-волновых воздействиях при характерных временах нарастания волновых фронтов 10^{-8} - 10^{-9} с., или низких температурах), либо в «бездефектных кристаллах», когда возбуждение динамических смещений является единственным механизмом неупругой деформации. Этот результат позволил сделать вывод о принципиальной недостижимости «теоретической прочности кристалла», что связано с «эффектами туннелирования» при деформации кристалла, когда наблюдается пересечение энергетических уровней, соответствующих различным структурным состояниям, еще до того как произойдет потеря устойчивости кристалла относительно малых возмущений структуры.

В третьем разделе проведен анализ начальных стадий пластической деформации реальных кристаллических и поликристаллических твердых тел и исследуются необратимые структурные превращения в кристаллах на наномасштабном уровне при одновременном возбуждении динамических и термически активируемых смещений в однородном неупруго-деформированном кристалле. Отмечаются особенности пластической деформации, обусловленные механизмами различных структурных и масштабных уровней (фазовые и структурные превращения, зарождение и движение дефектов, образование границ раздела при фрагментации), что предполагает введение переменных и описание кинетики деформации, связанных с различными носителями, их коллективными свойствами. Акцент исследований в данном разделе сделан на описание механизмов неупругости, возникающих на масштабах порядка межатомных расстояний и временах, превышающие периоды колебания атомов (время Дебая). Величина коэффициента переноса (отношение квадрата масштаба к времени),

характеризующая динамику «обратимой неупругости», отражает эффекты нелокальности, связанные с пространственной неоднородностью коллективных возбуждений и отвечает, наряду с «метастабильностью», за формирование пространственных масштабов автосолитонных и стационарных коллективных мод «обратимой неупругости».

Переход от атермических коллективных «обратимых мод» к термически активируемым модам собственно пластичности связывается с эффективным понижением барьеров в области метастабильности при формировании нового «потенциального рельефа», определяемого атермическими коллективными модами. Кинетические уравнения, описывающие эволюцию атомных функций плотности, формулируются в приближении Гинзбурга-Ландау и в случае однокомпонентного кристалла позволяют ввести скалярный параметр порядка, определяющий необратимые изменения внутренней структуры в деформируемой среде. Параметрами кинетического уравнения для скалярного параметра порядка являются характерные времена возбуждения термических смещений и масштабы неоднородностей параметра порядка. Представляет интерес установленный сценарий зарождения локализованного сдвига, включающий инициирование одного или серии автосолитонов, приводящих к формированию ячеистых структур, границы которых представляют собой локализованные сдвиги, характерные для стадии параболического упрочнения на кривой пластического деформирования. Полученная «связанная» система уравнений для «динамических» и «термо-активированных» смещений описывает динамику уменьшения барьера термодинамического потенциала и «подключения» конечно-амплитудной термо-активированной кинетики локализованного пластического течения и развития очагов разрушения – зарождения микротрещин. В последнем случае динамические смещения атомов, инициирующие появление избыточного объема, приводят к зарождению микротрещины при напряжениях, существенно меньших теоретической прочности кристалла.

Следует отметить, что «связанные» сценарии формирования атермических и термоактивируемых мод могут наблюдаться, по-видимому, в диапазоне скоростей деформирования, близких к 10^6 - 10^8 с⁻¹ (область перехода, к так называемым, перегрузочным –overdriven волновым фронтам). При менее интенсивных нагрузках конечно-амплитудные моды атермической деформации формируют «потенциальный рельеф», который «преодолевается» при переходе через пороговые напряжения, определяемые как предел текучести, с последующей реализацией термо-активируемой кинетики необратимого деформирования - пластичности. Данный сценарий приводит к автомодельным закономерностям развития термо-активированной пластичности.

Содержательными являются результаты о стадийности развития трещин (инкубационном, определяемом формированием динамических неупругих смещений, раскрытием трещины с последующей реализацией стационарного состояния) и роли поверхности в зарождении пластической деформации. Развитые представления о закономерностях формирования атермических коллективных мод в атомной подсистеме послужили основой для важного вывода о свойстве поверхности как неравновесной системе с характерным размером неоднородности и значением коэффициента переноса (нелокальности) существенно превышающем его значение в объеме, что приводит к локализованным неупругим смещениям, превышающим критическое значение возбуждения автосолитонов в объеме материала.

Четвертый раздел посвящен обоснованию феноменологической теории формирования макроскопических пространственно-временных структур в деформируемых средах с учетом связи стадийности пластического течения и закономерностей формирования определенного типа дислокационных ансамблей при переходе от одной стадии пластического течения к другой.

Вводится понятие структурного элемента как области когерентного смещения точек деформируемой среды на масштабе длины когерентности в последовательности, определяемой набором характерных времен, имеющих смысл времен релаксации. В каждый момент времени образуются те структуры,

для формирования которых требуется наименьшее время, и с которыми связывается определенный тип параметра порядка. Отмечается важный признак динамики формирования пространственно-временных структур, учитывающих многомасштабные механизмы структурной релаксации, обусловленной дефектами – существенная неравновесность, которая должна быть отражена в полевых (базовых) уравнениях, описывающих движение дефектов. Показано, что движение структурных элементов сопровождается возбуждением дополнительных (поступательных и вращательных) степеней свободы, определяющих соответствующую моду деформации с «длинами когерентности» существенно превышающими межатомные расстояния. Последовательность инициирования мод соответствует переходам от возбуждения «быстрых» мод к «медленным», при этом не исключается инициирование мод с длиной когерентности порядка межатомных расстояний, что характерно для фазовых превращений (TRIP – transformation induced plasticity) и больших пластических деформаций, приводящих к фрагментации до наноструктурных масштабов.

Формирование макроскопических пространственно-временных структур в деформируемых средах сопоставляется в разделе 4.3 с чередованием линейных, параболических и переходных стадий и соответствующими сценариями локализации пластической деформации. Полевые уравнения формулируются в терминах «быстрых» и «медленных» переменных, описывают появление пространственно-временных структур в зависимости от значений параметров и вида неустойчивости. Показано, что разнообразие пространственно – временных распределений макроскопической пластической деформации на каждой стадии кривой течения обусловлено разным характером неустойчивости исходной внутренней структуры относительно возмущений различного типа.

Исследованы пространственно-временные структуры при сверхпластическом течении поликристаллов в сопоставлении с традиционным механизмом развития сверхпластического течения, сопровождающегося образованием

«бегающих шеек». Показано, что данным режимам соответствуют автомоделные решения в виде «бегающих автосолитонов», формирующих систему бегущих полос локализованной пластичности.

В разделе 4.5, посвященном образованию мезоскопических полос локализованного сдвига, на основе полученных полевых уравнений установлено, что скорость пластической деформации пропорциональна скорости всех типов структурных превращений. Как следствие, динамика формирования и распространения мезоскопических полос локализованного сдвига определяется как длиной, так и толщиной образца, при этом минимальная длина образца, на которой могут быть введены макроскопические характеристики пластичности, соответствует масштабу, на котором «вырождаются» масштабы «мезоскопических» структур локализованной пластичности.

В пятом разделе обсуждаются основные эффекты, наблюдаемые при воздействии импульсного электрического тока на ускорение пластической деформации и увеличение скорости ползучести, и обосновывается единый механизм, связанный с расщеплением энергетических уровней кристалла при поляризации среды в электрическом поле. Показано, что величина расщепления для многоэлектронных систем, пропорциональная квадрату напряженности электрического поля (квадратичный эффект Штарка), приводит к изменению картины пересечения энергетических уровней кристалла при деформации. Анализ зависимости потенциала межатомного взаимодействия (в терминах параметра порядка) показал качественную смену устойчивости системы к развитию неупругой деформации, сопровождающуюся уменьшением величины потенциального барьера при совмещении электроимпульсного воздействия с нагружением образца. Предложено объяснение влияния длительности импульса, периода следования импульсов на проявление эффекта и показано наличие дополнительных гармоник, связанных со временем релаксации системы, которые могут быть инициированы при уменьшении длительности импульса.

В разделе «Заключение» сформулированы основные результаты и выводы, обобщающие связь развиваемого направления с рядом фундаментальных проблем неупругого деформирования, рассмотренных в диссертации с учетом роли межатомных взаимодействий при электронных переходах Ландау-Зинера между энергетическими уровнями, и поведением системы, находящейся в смешанном «полевом» состоянии, объединяющем атомную и дефектную подсистемы.

В целом, работа отличается **новизной** подхода к описанию необратимой деформации как структурного превращения, инициированного возбуждением динамических смещений атомов в кристалле при его деформации, в том числе в присутствии электрического поля.

Достоверность полученных в работе результатов и выводов обеспечивается использованием известных методов квантовой теории, теории систем далеких от состояния равновесия, качественным согласием полученных результатов с известными экспериментальными данными.

Сделанные в диссертационной работе выводы **обоснованы** и полностью отвечают задачам исследования и полученным результатам.

Отмечая содержательность, принципиальную новизну и оригинальность ряда результатов, считаю целесообразным обсудить некоторые из них в **критическом контексте**:

1. «Связанные» сценарии формирования атермических и термоактивируемых мод могут наблюдаться, по-видимому, в диапазоне скоростей деформирования, близких к 10^6 - 10^8 с⁻¹ (область перехода к перегрузочным –overdriven волновым фронтам), обсуждение которых позволило бы автору получить ряд количественных оценок для параметров моделей, определяющих смешанные «полевые» состояния, объединяющем атомную и дефектную подсистемы.

2. Количественные оценки для параметров, определяющих вклад «перекрестных» членов, времен релаксации, пространственных масштабов и коэффициентов переноса (нелокальности) в уравнениях для параметров порядка атомной и дефектной подсистем могли бы быть получены на основе анализа

многочисленных данных по релаксации упругих предвестников при формировании и распространении упруго-пластических фронтов.

Сделанные замечания не меняют общей положительной оценки диссертации и могут рассматриваться в качестве пожеланий для дальнейшего развития работы. Результаты вносят весомый вклад в понимание фундаментальных проблем физики пластической деформации твердых тел и могут использоваться в исследовательской и практической работе ряда организаций, изучающих многоуровневые проблемы физики процессов протекающих в деформируемых средах в широком диапазоне интенсивностей воздействий. В их числе институты Российской Академии наук: ФТТ РАН, ФТИ им.Иоффе РАН, ИМЕТ РАН, ИФМ УрО РАН, ИМСС УрО РАН, ИФПМ СО РАН, ИТПМ СО РАН, ИГиЛ СО РАН; отраслевые институты ЦНИИ ЧерМет, ВИАМ, ВНИИНМ; образовательные: МИСИС, МФТИ, СпГУ, МИФИ, ТГУ, ТПУ.

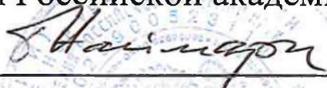
Результаты работы были представлены на российских и международных конференциях, отражены в 29 публикациях, в том числе в 27 статьях в научных журналах, включенных в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание учёной степени доктора наук, а также в одной статье в специальном выпуске научного журнала, одной коллективной монографии (на русском и английском языках). Автореферат отражает основное содержание диссертации, выводы и положения, выносимые на защиту.

На основании вышесказанного считаю, что Петр Петрович Каминский выполнил содержательное исследование, и диссертация «Необратимая деформация кристаллов как структурное превращение, инициируемое изменением межатомного взаимодействия» представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, выполненную на высоком уровне, в которой решена проблема объяснения механизма необратимых структурных превращений в кристаллах при деформации, в том числе при деформации в электрических полях. Работа отвечает всем требованиям, предъявляемым к

диссертационным работам на соискание ученой степени доктора наук (пункты П.9-14 Положения о порядке присуждения ученых степеней). Считаю, что автор работы Петр Петрович Каминский, несомненно, заслуживает присуждение ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук, профессор,
заведующий лабораторией физических основ прочности
Федерального государственного бюджетного учреждения
науки Институт механики сплошных сред Уральского
отделения Российской академии наук



Олег Борисович Наймарк

Дата: 5 октября 2015 г.

614013, Пермь, ул. Академика Королева, д. 1

Тел. (3422) 37-84-61, факс (3422)37-84-87,

E-mail: mvp@icmm.ru

Подпись Наймарка О.Б. заверяю

Ученый секретарь

ИМСС УрО РАН



Наталья Алексеевна Юрлова