

ОТЗЫВ

научного руководителя о работе Брюханова Ильи Александровича по кандидатской диссертации «Исследование влияния наноразмерных включений и адсорбции газов на механические свойства кристаллических материалов», представленной к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 – Механика деформируемого твёрдого тела.

Диссертация Брюханова Ильи Александровича посвящена изучению двух типов процессов, реализующихся в кристаллических телах - образования и развития дислокаций, с одной стороны, и объёмной химической реакции в регулярных порах, с другой. Объектами первого направления являются механизмы и кинетика процессов развития дислокаций в сплавах алюминия с медью, широкое использование которых в авиастроении указывает на практическую важность данной части. Наиболее важную часть второго раздела составляют расчёты упругих свойств при протекании химических процессов во всем объёме поликристаллов цеолитов, а, точнее, в их порах, имеющих регулярную структуру. Возможность связать картину на микроскопическом уровне с изменением макропараметров и деформацией твёрдого тела реализована с помощью серии молекулярнодинамических и квантовомеханических методов. Последние становятся частью современной механики твёрдого тела. Работа соискателя по моделированию методами молекулярной динамики сплавов, в том числе, содержащих зоны Гинье-Престона, стала логическим продолжением широкой серии исследований механизмов развития дислокаций в чистом алюминии и сплавах, их взаимодействия с включениями примесной фазы, точечными дефектами, границами зерен или вакансиями при высоких ударно-волновых нагрузках. В отношении имевшегося задела к началу работы над диссертацией качественно

отличается вторая задача по описанию влияния хемосорбционных процессов с образованием химических соединений на упругие свойства поликристаллов. Даже к настоящему моменту подобные результаты относительно влияния химических реакций на упругие свойства поликристаллов не получены в других известных мне работах. Подобные оценки были выполнены лишь для случаев фазовых переходов, физисорбции и капиллярной конденсации. Рассматриваемые химические процессы включают образование карбонатов и гидратацию катионов – процессы, протекающие при обычных условиях и имеющие важное значение для промышленных процессов адсорбции, разделения и переработки газов. Автору удалось освоить широкий спектр методов от моделирования путей реакции до расчёта упругих постоянных и впервые получить оценку эффекта перестройки структуры в результате химической реакции на упругие постоянные серии цеолитов. Одновременно было показано согласие данных расчётов с экспериментальными данными относительно структуры объектов и энергии активации реакции.

Диссертация состоит из введения, трёх глав, заключения, списка литературы, выводов, списка публикаций по теме диссертации, рисунков, таблиц и четырёх приложений.

Во введении даётся краткая характеристика изучаемых объектов с акцентом на имеющиеся экспериментальные данные по относительной деформации кристаллических твёрдых пористых тел при адсорбции и конденсации газов, динамике обмена ионов, их роль в стабилизации образующихся карбонатов. Даётся краткий обзор методов, применяющихся для описания зарождения и развития дислокаций, от модели пластической деформации по Френкелю до современной формы кинетического уравнения изменения плотности подвижных дислокаций, и обосновывается роль молекулярной динамики для исследований в этой области. Устанавливается

место настоящей диссертационной работы среди современных исследований сплавов с ГЦК решёткой.

В первой главе подробно описаны применяемые методы расчётов, особенности применяемых подходов теории функционала плотности, атомных потенциалов и комбинации силовых полей, использованных соискателем. Рассмотрены возможные процедуры расчёта упругих постоянных и аппарат молекулярной динамики.

Вторая глава посвящена изучению механизмов зарождения и движения дислокационных петель в сплавах алюминия с медью. Автором найден механизм гетерогенного зарождения в сплавах с образованием области дефекта упаковки внутри зародыша, ограниченного атомами, находящимися в переходном ГЦК-ГПУ положении. Данный механизм близок к описанному группой исследователей из Университета Пекина через плоские октаэдрические структуры практически параллельно с соискателем. В случае присутствия в сплавах зон Гинье-Престона автором было впервые смоделировано несколько механизмов гетерогенного зарождения дислокаций, которые зависят от температуры и проявляются на разных временных масштабах и в разных частях зон. Впервые рассчитана кинетика движения дислокационных петель как в традиционных сплавах (от 0.1 до 5% Cu), так и в сплавах с зонами Гинье-Престона разных размеров. Зависимости энергии активации и активационного объема от температуры для алюминия с зонами Гинье-Престона разных диаметров указывают на возможное изменение механизма зарождения дислокаций около 400 К. Автором была построена модель релаксации сдвиговых напряжений на основе соотношения Орована, связывающем скорость пластической деформации, плотность и среднюю скорость дислокаций. Было показано, что зарождение дислокаций является основным механизмом пластической деформации при скоростях выше 10^6 с^{-1} , а рассчитанная плотность подвижных дислокаций при релаксации сдвиговых

напряжений близка к экспериментальной плотности подвижных дислокаций в ударной волне.

В последней, третьей главе исследуется поведение упругих свойств (объёмного модуля, модулей сдвига, Юнга, коэффициента Пуассона, относительных ассиметрий модулей, компонент линейной сжимаемости) цеолитов разного состава относительно физической адсорбции и хемосорбции. Обе задачи решены численно: и методами атомных потенциалов, и методами теории функционала плотности. Наиболее важным результатом данной части является последовательное моделирование реакций образования карбонатов и гидрокарбонатов, как и изменение модулей упругости в результате протекания реакции. Если вымывание алюминия из каркаса привело к вполне ожидаемому понижению модулей, впервые рассчитанному соискателем, то сопоставимое по порядку величины понижение модулей при образовании карбонатов и гидрокарбонатов оказалось новым и неожиданным результатом, поскольку не приводит к нарушению связности каркаса, а только к перемещению катионов и перераспределению их координации между атомами кислорода и карбоната. Аналогичные изменения в координации катионов при добавлении воды в цеолиты показали, что вода может выполнять ту же роль, что и карбонаты, приводя к существенным вариациям упругих свойств.

В Приложениях представлены как данные, связанные с полученными результатами (А, В, Г), так и дополнительные комментарии к методам (Приложение Б), описанным в Главе 1, которые соискатель счёл нужными расширить.

Следует отметить, что в работе над диссертацией И.А. Брюханов проявил несомненные способности, инициативность, интерес к работе и умение добиваться результата.

Основные результаты в достаточной мере опубликованы в рецензируемых специализированных журналах, а также апробированы на семинарах в НИИ

механики и на кафедрах механико-математического факультета МГУ, семинаре Института проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, семинаре кафедры Теоретической механики СПбГТУ, междисциплинарном семинаре ВЦ РАН, семинаре ИПМаш РАН (г. Санкт-Петербург), российских и международных конференциях.

Считаю, что диссертация работа «Исследование влияния наноразмерных включений и адсорбции газов на механические свойства кристаллических материалов» удовлетворяет всем требованиям ВАК РФ к кандидатским диссертациям, а её автор – Илья Александрович Брюханов достоин присвоения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 – Механика деформируемого твёрдого тела.

Научный руководитель

ведущий научный сотрудник кафедры физической химии

химического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова

(119991, Москва, Ленинские горы д.1, стр. 3, ГСП-1, МГУ,

химический факультет

тел: +74959391671, тел/факс: +74959328846

сайт: www.chem.msu.ru, email: dekanat@chem.msu.ru),

кандидат химических наук

(тел: +74959393952, email: nasgo@yandex.ru)



А. В. Ларин

Подпись ведущего научного сотрудника А. В. Ларина заверяю

И.о..декана химического факультета МГУ

Член-корреспондент РАН, профессор



С.Н. Калмыков