

УТВЕРЖДАЮ:

И.о. ректора Сибирского государственного
индустриального университета,
к.т.н., доцент Корнев Евгений Сергеевич



_____ 20__ г.

ОТЗЫВ

ведущей организации федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Сибирский государственный индустриальный университет» на диссертацию Бебихова Юрия Владимировича «Нелинейная динамика решетки и поведение дефектов кристаллической структуры в неравновесных условиях», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Актуальность проблемы. Кристаллические материалы в процессе их обработки или использования часто оказываются в далеких от термодинамического равновесия состояниях. В настоящее время большое внимание ученых уделяется анализу сложных физических картин подобных состояний на различных уровнях, начиная от атомистического и заканчивая макроуровнем. С ростом доступности высокопроизводительных компьютеров и развитием методов компьютерного анализа наблюдается стремительное развитие атомистического моделирования. Сравнительно недавно появились новые объекты изучения в нелинейной динамике кристаллической решетки, такие как дискретные бризеры и делокализованные колебательные моды, которые могут вносить заметный вклад в диссипацию энергии, подведенной к материалу. Интерес для практики представляет также воздействие электрического тока высокой плотности на структуру металлических материалов и на возможность повышения пластичности в ходе их формоизменения.

Представленная работа посвящена изучению различных внешних воздействий на кристаллы, приводящих к проявлению таких эффектов как: эффект супратрансмиссии, реализуемый при воздействии на кристалл на частотах выше фононного спектра; хаотические дискретные бризеры, возникающие по механизму развития неустойчивости делокализованных колебательных мод (ДКМ); расчет кинков; а также воздействие импульсов

тока на дефекты кристаллической решетки. Исследование соискателем данных эффектов является **актуальным и важным** как с научной точки зрения, так и с точки зрения практического применения методов интенсивного воздействия на кристаллические вещества с целью модификации их структуры и улучшения свойств. В работе изучены различные механизмы возникновения дефектов в кристаллической решетке при неравновесных условиях, движение солитоноподобных объектов, а также их влияние на макроскопические свойства материала.

Практическую ценность имеют результаты теоретического изучения электропластического эффекта. В частности, с использованием одномерной модели кристалла с кинком (моделирующем дислокацию) было показано, что при относительно низких температурах преимущественное выделение джоулева тепла на дислокации за счёт импульса электрического тока даёт больший вклад в электропластичность, чем электронный ветер. Однако при температурах выше определённого значения ситуация меняется на противоположную и вклад в электропластичность от электронного ветра становится больше, чем от неоднородного выделения джоулева тепла на дислокации. Также автором диссертации была создана экспериментальная установка, позволяющая изучать электропластический эффект на образцах из проволок или полос металла в условиях ползучести при постоянной нагрузке.

Результаты диссертации могут быть использованы в научных организациях и группах, занимающихся вопросами нелинейной физики материалов, а также разработкой теоретических основ создания новых материалов, в том числе ИФМК УФИЦ РАН (г. Уфа), Политехнический институт (филиал) СВФУ (г. Мирный), Уфимский университет науки и технологий (г. Уфа) и многие другие.

Диссертация является результатом самостоятельной работы автора, представленные в ней результаты получены лично автором, либо в соавторстве.

Достоверность представленных в работе результатов не вызывает сомнения, она обеспечена сопоставлением аналитических результатов с результатами численного моделирования, применением известных численных методов высокой точности, физической непротиворечивостью результатов, их согласием с имеющимися литературными данными. В работе использовался хорошо зарекомендовавший себя метод молекулярной динамики, универсальные классические потенциалы Морзе и бета-ФПУ, наиболее часто применяемые для описания многих нелинейных эффектов в кристаллах. Разработана экспериментальная установка для изучения электропластического эффекта, которая показала результаты не противоречащие известным экспериментальным и теоретическим исследованиям.

Структура и содержание работы. Диссертация хорошо логически структурирована, состоит из введения, семи глав, заключения и списка литературы из 305 источников. Работа изложена на 306 страницах машинописного текста, содержит 112 рисунков и 3 таблицы.

Во введении представлен обзор литературы, история изучения нелинейной динамики решетки, обоснована актуальность работы, сформулированы основные цели и задачи исследования.

Первая глава диссертации является обзорной, в ней уделено внимание описанию области и методов исследования, представлен обзор литературы от пионерских работ до передового края исследований. В частности, говорится о том, что высокоэнергетические внешние воздействия на кристаллы приводят кристаллическую решетку в неравновесное состояние, в котором протекают структурные перестройки, связанные с зарождением, движением и аннигиляцией топологических дефектов. Это сопровождается массопереносом, разогревом, возбуждением локализованных солитоноподобных объектов, таких как ударные волны и дискретные бризеры, вносящие свой вклад в транспорт энергии и вещества.

Во второй главе приводится анализ делокализованных колебаний нелинейных решеток, а именно простой кубической и ОЦК решеток со взаимодействиями между первыми и вторыми соседями, описываемыми потенциалом бета-ФПУ. Аналитически получены дисперсионные соотношения и найдены максимальные частоты фононных колебаний. Численно рассчитаны амплитудно-частотные характеристики делокализованных колебательных мод (ДКМ) и выявлены те, что имеют частоты выше фононного спектра.

В третьей главе описывается построение дискретных бризеров (ДБ) при помощи делокализованных колебательных мод с частотой выше фононного спектра путем наложения локализуемой функции. Используя данный подход, были найдены одномерные и нульмерные ДБ двумерной квадратной решётки, а также нульмерные ДБ трёхмерной ОЦК решётки. Тем самым показана эффективность подхода к построению ДБ решёток любой размерности, основанного на локализации ДКМ с частотами вне фононного спектра решетки.

Четвертая глава диссертации посвящена исследованию влияния хаотических ДБ на макросвойства нелинейных цепочек как с локальным потенциалом, так и без него. Установлено, что ДБ оказывают влияние на макроскопические свойства нелинейных решёток, что позволяет ставить эксперименты по доказательству существования ДБ в кристаллах путём измерения их макросвойств в зависимости от температуры. Популяция ДБ, как нелинейных объектов, должна возрастать с ростом температуры.

В пятой главе в рамках модели Клейна-Гордона с асимметричным локальным потенциалом изучено направленное движение кинка в присутствии внешнего стохастического воздействия. Использовались следующие начальные условия: в системе

имеется статический равновесный кинк, и при $t = 0$ начинает действовать случайная внешняя сила. Расчеты проведены как при отсутствии, так и наличии в системе вязкого трения и показано, что введение затухания качественно меняет динамику системы.

В шестой главе описаны результаты экспериментальных исследований физических основ электропластического эффекта. С этой целью, разработана и собрана экспериментальная установка, позволяющая изучать влияние одиночных импульсов тока на скорость деформации ползучести тонких металлических образцов (проволок, лент), нагруженных постоянным грузом до заданной скорости ползучести.

В седьмой главе рассмотрено атомистическое моделирование электропластического эффекта в рамках одномерной цепочки Френкеля-Конторовой, где дислокации моделируются кинками и в рамках двумерной решётки Морзе с введёнными в неё краевыми дислокациями. Как известно, существуют две основные теории, объясняющие эффект электропластичности: одна - неравномерное тепловыделение с максимальным выделением джоулева тепла на дефектах, другая - теория электронного ветра. Предложена физическая модель, позволяющая моделировать оба эффекта на атомарном уровне.

В заключении сформулированы основные результаты диссертации и выводы по работе.

Публикации и апробация работы. Материалы диссертации достаточно полно опубликованы в 13 статьях в журналах, входящих в список изданий, рекомендованных ВАК РФ, а также индексирующихся в базах данных Scopus и Web of Science (38 статей), апробированы на большом числе конференций различного уровня. Имеется 4 свидетельства о регистрации программ для ЭВМ в соавторстве. Опубликовано монография.

Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Новизна полученных результатов включает: получение новых ДБ различной симметрии в двумерных и трехмерных решетках, отталкиваясь от анализа ДКМ; обнаружение возможности возбуждения ДБ при периодическом воздействии на решетку на частоте внутри фононного спектра, близко к его краю; доказательство влияния хаотических ДБ на макросвойства нелинейных цепочек. Показано, что появление хаотических ДБ в результате неустойчивого распада ДКМ с частотами вне фононного спектра реализуется в решетках любой размерности; при проведении расчета кинков в модели Клейна-Гордона с асимметричным потенциалом показано, что добавление вязкого трения в систему позволяет наблюдать смену направления движения кинка под действием случайных сил. Создана экспериментальная установка для изучения электропластического эффекта при ползучести на образцах из проволок или полос металла, проведено компьютерное моделирование эффекта дислокационной электропластичности в нелинейной цепочке, которое показало, что при

низких температурах большой вклад в электропластичность даёт выделение джоулева тепла на дислокации, а при более высоких - электронный ветер.

Соответствие паспорту специальности

Работа соответствует паспорту специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния (физико-математические науки) по следующим пунктам: 5. Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения; 6. Разработка экспериментальных методов изучения физических свойств и создание физических основ промышленной технологии получения материалов с определенными свойствами; 7. Теоретические расчеты и экспериментальные измерения электронной зонной структуры, динамики решётки и кристаллической структуры твердых тел.

Замечания

1. Название диссертации носит слишком широкий характер. Автор исследует лишь небольшую часть нелинейных возбуждений из всего существующего спектра.
2. В главе, посвященной анализу делокализованных мод в ОЦК решетке, было бы уместно рассмотреть реалистичные металлические кристаллы, описываемые многочастичными потенциалами.
3. Динамический объект в системе Cr_2Al нельзя назвать дискретным бризером, так как свойства этого объекта не соответствуют определению бризера, данному автором в первой главе работы.
4. Напряжения в цепочке с параметром $\alpha=0$ демонстрируют осцилляции в момент времени, когда параметр локализации находится на плато, что сильно отличает поведение данной цепочки от ее аналогов с другими параметрами потенциала. Автором не дано объяснения этого явления в рамках работы.
5. В главе, посвященной электропластичности, автором рассматриваются границы зерен в медном проводе, при этом в разделе моделирования в качестве дефектов рассмотрены дислокации. Рассмотрение одного типа дефектов как численными так и экспериментальными методами было бы более уместно в данной работе.

Указанные замечания не изменяют положительной оценки работы и носят рекомендательный характер.

Заключение

Представленная диссертационная работа выполнена на высоком научно-техническом уровне и представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой изучены нелинейные колебательные моды кристаллов, отклик кристаллической решетки на

периодические внешние воздействия, а также поведение дефектов кристаллической структуры в неравновесных условиях и их влияние на свойства кристаллов.

По научному уровню, полученным результатам, содержанию и оформлению представленная работа является законченной научно-квалификационной работой, соответствующей пункту 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (ред. от 26.01.2023). В ней совокупность полученных автором новых результатов можно квалифицировать как научное достижение в области физики конденсированного состояния, связанное с описанием нелинейных динамических эффектов в кристаллической решетке, вызываемых экстремальными внешними воздействиями.

Автор диссертации Бебихов Юрий Владимирович заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния.

Отзыв рассмотрен и одобрен на расширенном заседании кафедры естественнонаучных дисциплин СибГИУ, протокол № 12 от «10» апреля 2024 года. На заседании присутствовало 15 человек. Результаты голосования: «за» - 15, против – нет, воздержавшихся - нет.

Заведующий кафедрой естественнонаучных дисциплин им. профессора В.М. Финкеля, доктор физико-математических наук (специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния), профессор

Громов Виктор
Евгеньевич

Ученый секретарь кафедры естественнонаучных дисциплин им. профессора В.М. Финкеля, кандидат технических наук (специальность 01.04.07 – Физика конденсированного состояния), доцент

Мартусевич Елена
Владимировна

Подписи В.Е. Громова и
Е.В. Мартусевич удостоверяю
Начальник отдела кадров СибГИУ



Миронова
Татьяна Анатольевна

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Сибирский государственный индустриальный университет» (СибГИУ)
654007, г. Новокузнецк, ул. Кирова, зд. 42

E-mail: rector@sibsiu.ru; Тел.: +7 (3843) 77-79-79, Факс: +7(3843) 46-57-92