

Відгук

офіційного опонента на дисертаційну роботу

Закарян Дори Арамаісівни

“Першопринципні методи розрахунку фізичних характеристик тугоплавких бінарних евтектичних композитів”,

висунутої на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла.

Останнім часом значного поширення в фізиці твердого тіла і фізичному матеріалознавстві отримали першопринципні розрахунки. В першу чергу це обумовлено інтенсивним розвитком нанотехнологій. Гранично малі розміри наночастинок є причиною значних труднощів для експериментального визначення їх властивостей, проте це відкриває значні перспективи для чисельного моделювання. Більш того, стабільність цих наносистем і їх механічні та функціональні властивості напряму залежать від параметрів міжатомної взаємодії, що є об'єктом першопринципних розрахунків. У більшості випадків першопринципні розрахунки використовуються для прогнозування властивостей однофазних матеріалів, що обумовлено обмеженнями на кількість атомів в представницькому об'ємі, для якого проводяться обчислення. Це створює принципові перепони на шляху використання цих методів для моделювання властивостей різних композицій. З іншого боку, першопринципні методи є потенційно зручним інструментом для кількісного аналізу фізичної природи впливу хімічного складу та кристалічної будови на величину модулів пружності, температури плавлення та інших мікроструктурно - нечутливих характеристик сплавів в макрооб'ємах. Зокрема, це стосується тугоплавких бінарних сплавів. У зв'язку з чим, розробка підходів, які дозволяють використовувати першопринципні методи для розрахунку фізичних властивостей сплавів та композитів є актуальною проблемою фізики твердого тіла і має важливе прикладне значення для фізичного матеріалознавства.

Дисертаційна робота Д.А. Закарян о виконувалась в рамках чотирьох бюджетних тем Інституту проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича НАН України та двох міжнародних проектів УНТЦ.

Дисертаційна робота складається із вступу, 7 розділів, висновків, списку використаної літератури з 183 найменувань та Додатку. Вона викладена на 280 сторінках, містить 47 рисунків і 37 таблиць.

До основних результатів дисертаційної роботи слід віднести:

1. Розроблений оригінальний метод розрахунку термодинамічного потенціалу бінарних систем. Особливість цього методу та його ефективність забезпечується використанням апріорного потенціалу, представницьких об'ємів для кожного компонента і поняття «віртуального» кристала. В рамках запропонованого підходу проведено моделювання міжфазних меж, проаналізована роль квазі-когерентної межі в процесі утворення евтектики, встановлений зв'язок температури плавлення в точці евтектики і енергії взаємодії між компонентами в бінарних системах.

З прикладної точки зору, важливим результатом є отримана аналітична залежність, яка дозволяє прогнозувати склад і температуру евтектики для двокомпонентних композитів типу: «борид-борид», «борид-карбід», «карбід-карбід», «метал-метал», та «метал-карбід».

2. В роботі обґрунтовано ефективність використання «представницького об'єму» («молекули») для матеріалів, які мають складну кристалічну ґратку і складаються з декількох типів атомів. Такий підхід дозволяє не лише зменшити похибку розрахунків у випадку коли об'єми атомів сильно різняться, але і на порядки зменшити витрати часу на розрахунки.

3. За результатами комп'ютерного моделювання встановлені принципи формування міжфазних границь в досліджуваних сплавах. На цій основі запропонована модель утворення міжкомпонентних границь в евтектичних системах. Проаналізовано вплив міжкомпонентної взаємодії на температуру плавлення евтектики. Проведено аналіз ефекту зниження температури плавлення евтектики в результаті цієї взаємодії.

4. Розроблено підхід, який спрощує розрахунок енергії взаємодії в кристалах з щільноупакованими атомними площинами. Цей підхід можна узагальнити на шаруваті структури в цілому. Запропоновані аналітичні залежності середньої енергії взаємодії щільноупакованих атомних площин від форми та розмірів кристалів. На цій основі отримані залежності, що описують розмірний ефект для концентрації і температури плавлення евтектики.

5. В рамках цього підходу отримані дані щодо міцності зв'язку між щільноупакованими площинами. Результати проведених розрахунків з достатньою точністю узгоджуються з літературними даними. Зроблена спроба розрахувати роботу руйнування по щільноупакованим площинам та оцінити величину тріщиностійкості для ідеальних шаруватих структур.

6. Продемонстровано можливість використання апіорного потенціалу при визначенні пружних сталих. Для алмазу, BN та SiN результати розрахунків добре узгоджуються з експериментальними даними.

7. Заслуговує на увагу запропонований метод квазігармонійного наближення для розрахунку зміни об'єму елементарної комірки при нагріві кристала. Цей підхід можна розглядати як евристичний, проте він дозволяє отримати значення коефіцієнтів лінійного розширення, які досить добре узгоджуються з експериментальними даними для $L_a B_6$ і систем на її основі: $L_a B_6 - Z_r B_2$ та $L_a B_6 - T_i B_2$. Спираючись на цей метод отримані температурні залежності теоретичної міцності і модулів пружності монокристалів і бінарних евтектичних систем на їх основі ($L_a B_6 - T_i B_2$; $L_a B_6 - Z_r B_2$ та $L_a B_6 - H_f B_2$).

8. Введено поняття «віртуальної комірки», що дозволило описати процес міжатомної взаємодії на межах компонент композиту і на кількісному рівні врахувати вплив цієї взаємодії на теоретичну міцність нанокompозитів, модуль їх пружності та температуру плавлення в точці евтектики. Спираючись на ці результати було проаналізовано коректність використання «правила суміші» при прогнозуванні властивостей композитів за даними його складових.

Зауваження:

1. У виразі (5.34) для визначення питомої роботи утворення нових поверхонь в вершині тріщини допущена помилка. За верхню межу інтегрування береться міжплощинна віддаль, коли напруження досягає максимуму. Це приблизно в 2 рази занижує величину питомої роботи і в 1,4 рази – значення K_{Ic} .

2. Міцність нанокompозита не може визначатися середнім рівнем енергії міжатомної взаємодії. Розрив буде відбуватися по площинам, енергія взаємодії між якими мінімальна. У зв'язку з чим, не можна погодитися із запропонованими в дисертаційній роботі уявленнями щодо розмірного ефекту, який є наслідком залежності величини середньої міцності від розміру зразка.

3. В дисертаційній роботі має місце плутанина з визначенням поняття міцності. Для цієї характеристики використовуються наступні терміни: «міцність», «межа міцності», «тимчасовий опір руйнуванню», «тимчасовий опір міцності». У зв'язку з чим, отримані залежності напружень від деформації чомусь називаються залежностями міцності від деформацій (рис. 7.1) і теоретичної міцності (рис. 7.2). Це стосується

також і рис. 7.6. Залежність (7.1) дозволяє визначати напруження, а не теоретичну міцність.

4. На стор. 226 стверджується, що «значення міцності для композиту розраховані за допомогою правила «сумішей», де теоретична міцність системи представляються сумою теоретичних міцностей компонент з урахуванням їх об'ємних часток», проте наведена нижче формула (7.4) містить значення міцності однієї фази і величину напруження в другій фазі при критичній деформації руйнування першої фази.

5. В таблиці 5.3. наведені значення величини тріщиностійкості K_{Ic} для розтягу і стиску. Останнє, є некоректним, оскільки за визначенням K_{Ic} характеризує опір поширенню тріщини в умовах дії розтягуючих напружень (I-мода – нормальний відрив).

Зауваження до оформлення роботи:

В цілому робота гарно оформлена, проте зустрічаються деякі описки та термінологічні недоречності, а саме:

1. Використовується термін «тендітних матеріалів», замість «крихких матеріалів» (стр. 141, 155); «відносна деформація», замість «деформація» (стр.154).
2. В залежності (7.15) другим членом повинен бути вираз:

$$\frac{\partial U_{BB}(d_V)}{de_z}$$

Вказані зауваження не ставлять під сумнів основні результати роботи, їх новизну, наукову та практичну цінність.

Дисертаційна робота Закарян Д.А. виконана на високому науково-методичному рівні. Вона вносить значний вклад у розвиток першопринципних методів розрахунку фізичних характеристик бінарних евтектичних композитів. Закарян Д.А. вдалося розробити ефективний інструмент для теоретичного дослідження важливих для практичного використання композитів і отримати дані, щодо атомних механізмів формування їх фізичних властивостей.

Безпосереднє прикладне значення мають отримані в роботі температурні залежності модулів пружності кристалів і композитів, дані щодо впливу розмірного фактора на температуру плавлення і концентрацію евтектик $L_aB_6 - M_eB_2$. Запропоновані в роботі аналітичні залежності дозволяють прогнозувати вплив структурних складових на величину модулів пружності і коефіцієнтів лінійного

розширення тугоплавких бінарних евтектичних композитів та їх залежність від температури. Останнє є важливим для прогнозування поведінки цих композитів в екстремальних умовах при їх практичному використанні.

Дисертаційна робота оформлена у відповідності до вимог до докторських дисертацій. За матеріалами дисертації опубліковано 45 робіт, із них 24 статті у фахових вітчизняних та зарубіжних журналах. Результати досліджень пройшли апробацію на 17 представницьких наукових конференціях. Аналіз зазначених публікацій дозволяє стверджувати, що вони досить повно відображують зміст дисертаційної роботи. Основні результати дисертаційної роботи викладені в авторефераті.

Вважаю, що за актуальністю тематики досліджень, об'ємом, новизною та достовірністю отриманих результатів, за науковим та практичним значенням, робота відповідає вимогам до докторських дисертацій, а їх автор ЗАКАРЯН ДОРА АРАМАІСІВНА заслуговує присудження наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 фізика твердого тіла.

Завідувач відділу фізики міцності та руйнування

Інституту металофізики

ім. Г.В. Курдюмова НАН України,

доктор фізико-математичних наук, професор

С.О. Котречко

Підпис С.О. Котречко засвідчую:

Учений секретар Інституту металофізики

ім. Г.В. Курдюмова НАН України

кандидат фізико-математичних наук



С. В. Кочелаб