

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Покаташкина Павла Александровича
«Молекулярно-динамическое исследование механических свойств боронасыщенных соединений со структурой типа α -бора»
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Как это ни может показаться странным, свойства хрупких материалов и конкретные механизмы их неупругого деформирования при сжатии до сих пор остаются не вполне ясными в деталях. Для продвижения в этом направлении В.А. Покаташкиным использован метод молекулярно-динамического моделирования, позволяющий изучать движение элементарных носителей пластической деформации на атомарном уровне. Проблема, однако, в том, что для большинства хрупких материалов, характеризуемых, как правило, жесткими ковалентными межатомными связями, не разработаны потенциалы межатомного взаимодействия. Избрав в качестве объекта исследований карбид бора – высокотвердый материал, для которого нами было продемонстрировано безусловно хрупкое поведение при одноосном сжатии в ударной волне, В.А. Покаташкину пришлось потратить значительные усилия для построения потенциалов межатомного взаимодействия сначала α -бора, а затем и карбида бора в широком диапазоне температур и давлений. С этими потенциалами выполнены весьма нетривиальные расчеты и получены новые сведения о механизмах деформации карбида бора, в частности – об его аморфизации вдоль полос сдвига. Собственно говоря, образование и распространение аморфной прослойки и является, по мнению авторов, основным механизмом неупругого деформирования карбида бора.

В процессе работы над диссертацией соискателем выполнен большой объем теоретических и расчетных исследований, требующих высокой квалификации и большого времени. Результаты исследований хорошо документированы и опубликованы в авторитетных российских и международных изданиях. Тем не менее, по автореферату диссертации имеются замечания.

1. В работе предел текучести определялся путем моделирования проскальзывания зерен вдоль заранее сформированной аморфной прослойки. При этом расчетное значение напряжения течения, трактуемого как предел текучести, оказалось практически совпадающим со значениями, полученными из экспериментов с ударными волнами в микросекундном диапазоне длительностей действия нагрузки. Вообще говоря, в цитируемой работе даны совершенно другие экспериментальные значения напряжения. По-видимому, теоретик и экспериментатор оперировали разными компонентами тензора напряжений, но об этом в автореферате ничего не сказано. Как правило, экспериментальные данные показывают, что предел текучести возрастает с увеличением скорости деформации, поэтому декларируемое совпадение его расчетного значения (в пикосекундном временном диапазоне) с экспериментальным (при микросекундных длительностях) вызывает недоумение и требует каких-то комментариев. Возможно было бы более естественным характеризовать предел текучести напряжением зарождения полос сдвига, а не напряжением сдвига вдоль существующих аморфных прослоек. В связи с этим следует сказать, что начальное значение предела упругости довольно сильно зависит от давления как это и должно быть для хрупких материалов (V. E. Paris, E. B. Zaretsky, G. I. Kanel, and A. S. Savinykh. Diagnostics of Ductility, Failure, and Compaction of Ceramics under Shock Compression. In: Shock Compression of Condensed Matter – 2003, Eds. M. D. Furnish et al., AIP CP 706, pp. 747-750 (2004); G.I. Kanel, S.V. Razorenov, V.E. Fortov. Shock-Wave Phenomena and the Properties of Condensed Matter. Springer, New York, 2004). Такая зависимость типична при растрескивании хрупкого материала в условиях негидростатического сжатия.
2. Как это часто бывает, реферат содержит досадные опечатки.

Все перечисленные замечания носят рекомендательный характер и не снижают общей значимости диссертационной работы. Замечания не принципиальны и относятся скорее к стилю и качеству изложения, чем к качеству самой работы. Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г., а ее автор П.А. Покаташкин заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Отзыв составил заведующий отделением № 1.1 - Теплофизики интенсивных воздействий НИЦ-1 Научно-исследовательского центра теплофизики экстремальных состояний (НИЦ-1 ТЭС) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН) 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел. (495) 483-43-74, jiht.ru, kanel@ficpr.ac.ru

Член – корреспондент РАН, профессор д.ф.-м.н.



Канель Геннадий Исаакович

6 ноября 2018г.

Ученый секретарь ОИВТ РАН д.ф.-м.н.



Амиров Р.Х.

125412, г. Москва, Ижорская ул. 13, стр. 2, (495) 485-90-09, amirovravil@yandex.ru

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур (ОИВТ РАН) 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, (495) 485-82-44, webadmin@ihed.ras.ru