

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу

Солдатенко Оксани Михайлівни

на тему **«Прискорене масоперенесення за рахунок рухомих дислокацій при імпульсному навантаженні»**,

представлену на здобуття ступеня доктора філософії

в галузі знань **13 Механічна інженерія**

за спеціальністю **132 Матеріалознавство**

Актуальність теми дисертації.

Запорукою сучасного технологічного прогресу є розробка, створення та вдосконалення нових матеріалів з покращеними фізико-хімічними властивостями. Реалізація таких задач може здійснюватися за допомогою широкого спектру методів, зокрема, й імпульсною обробкою матеріалів, яка передбачає диспергування приповерхневих шарів внаслідок дії знакозмінних механічних напружень. При цьому зазвичай має місце інтенсифікація процесів масоперенесення в приповерхневій області матеріалу, внаслідок чого змінюються фізико-хімічні та механічні властивості системи, а також умови її стабільності. Крім того, одним з результатів імпульсної обробки можуть стати наноструктурні утворення на поверхні матеріалу, що суттєво відрізняються за своїми параметрами від об'ємного аналогу. Тому дослідження процесів, що протікають в зазначених нанорозмірних областях є важливою складовою для розуміння і прогнозування властивостей матеріалу в цілому. Саме такі дослідження проведені в дисертаційній роботі Солдатенко Оксани Михайлівни «Прискорене масоперенесення за рахунок рухомих дислокацій при імпульсному навантаженні», що свідчить про її актуальність. Мета роботи передбачає з'ясування механізмів атомної міграції у приповерхневих шарах металів під дією імпульсного знакозмінного навантаження задля розробки нового класу матеріалів з покращеними фізико-технічними характеристиками, що повністю відповідає актуальним проблемам сучасної науки і техніки.

Водночас, наноструктури є важливими не лише як модельні об'єкти для фундаментального вивчення фізичних процесів в матеріалах, але й мають вагоме прикладне значення для розвитку багатьох галузей і напрямів. Завдяки великій частці поверхневих атомів нанотрубки, нанокластери різної форми, нановолокна, та нанострижні характеризуються додатковими значеннями механічних напружень, що проявляється в процесах прискореного

масоперенесення. Систематичне вивчення таких процесів в наноструктурах на атомарному рівні є ключовим етапом для розробки стратегії керованого масоперенесення та деформаційного впливу на параметри матеріалів при імпульсній деформації. Реалізація досліджень різних фізичних процесів на атомарному рівні практично неможлива без використання сучасних методів комп'ютерного моделювання, за допомогою яких можна встановити фізичні закономірності в системі без залучення дороговартісного експериментального обладнання. Особлива роль відводиться методу молекулярної динаміки, функціонал якого дозволяє вивчення механічних, теплових, структурних властивостей, а також процесів перенесення в матеріалах. В дисертаційній роботі Солдатенко Оксани Михайлівни «Прискорене масоперенесення за рахунок рухомих дислокацій при імпульсному навантаженні» об'єктами досліджень обрано матеріали різної розмірності та морфології, включаючи, срібні нанотрубки та нанострижні, кристали чистого заліза, двошарові структури з алюмінію, що мають перспективи практичного використання. Тому проведене вивчення процесів дефектоутворення, масоперенесення і теплових властивостей цих матеріалів із залученням атомістичних методів є актуальними як з фундаментальної, так і прикладної точок зору.

Оцінка обґрунтованості наукових результатів дисертації, їх достовірності та новизни.

Наукова новизна результатів дисертаційного дослідження полягає в наступному:

- Методом молекулярної динаміки в роботі показано можливість існування наночастинок срібла, що характеризуються постійним значенням температурного коефіцієнта розширення в інтервалі температур 150 К – 450 К. На основі цього наукового результату запропоновано спосіб прецизійного керування коефіцієнтом лінійного теплового розширення матеріалу шляхом модифікації його поверхні з подальшою зміною структури. Новизна та достовірність вказаного результату підтверджуються отриманим патентом на винахід №127523 від 20.09.2023.

- Виявлено, що імпульсна деформація може зумовлювати аномальне масоперенесення в залізі з ОЦК-структурою та поблизу межі поділу двох металів з різним типом кубічної ґратки. В роботі показано, що механізм аномального масоперенесення зумовлений взаємодією полів напружень, що виникають навколо рухомих крайових дислокацій та міжвузлових атомів. Результатом такої взаємодії є рух міжвузельних атомів до ядра дислокації з можливістю подальшої його міграції з об'єму одного матеріалу в бік іншого.

Достовірність цього результату забезпечується використаною методикою моделювання з потенціалом МЕАМ, що пройшов апробацію в численних наукових роботах при моделюванні структурних, механічних і теплових властивостей твердотільних матеріалів, включаючи наноструктури.

Аналіз дисертаційної роботи та наукових публікацій, на основі яких її підготовлено, свідчить про адекватний вибір методів досліджень, використаний потенціал міжатомної взаємодії перевірено, а підхід автора до аналізу даних є ретельним та коректним. Вагомим підтвердженням достовірності результатів дисертаційної роботи є публікація основних її результатів в авторитетних наукових виданнях з обов'язковим анонімним рецензуванням.

Отже, в дисертаційній роботі поставлене наукове завдання виконано повністю, здобувач повною мірою оволодів методологією наукової діяльності.

Оцінка змісту дисертації, її завершеність та дотримання принципів академічної доброчесності.

За своїм змістом дисертаційна робота здобувача Солдатенко Оксани Михайлівни повністю відповідає Стандарту вищої освіти зі спеціальності 132 Матеріалознавство та напрямкам досліджень відповідно до освітньої програми Матеріалознавство.

Дисертаційна робота є завершеною науковою працею і свідчить про наявність особистого внеску здобувача у науковий напрям Матеріалознавство.

Розглянувши звіт подібності за результатами перевірки дисертаційної роботи на текстові співпадіння, можна зробити висновок, що дисертаційна робота Солдатенко Оксани Михайлівни є результатом самостійних досліджень здобувача і не містить елементів фальсифікації, компіляції, фабрикації, плагіату та запозичень. Використані ідеї, результати і тексти інших авторів мають належні посилання на відповідне джерело.

Мова та стиль викладення результатів

Дисертаційна робота написана українською мовою.

Дисертація складається з анотації українською та англійською мовами, вступу, п'яти розділів, висновків, списку використаної літератури та додатку. Загальний обсяг дисертації 126 сторінок. Робота ілюстрована 55 рисунками, містить 6 таблиць. Список використаних джерел містить 63 найменування.

У Вступі обґрунтовано актуальність теми дисертаційного дослідження, а також визначено мету роботи, її зв'язок з науковими темами і програмами, сформульовано основні задачі дослідження, охарактеризовано новизну і практичне значення наукових результатів. Також наведено інформацію про

особистий внесок здобувача та апробацію результатів дисертаційного дослідження.

У першому розділі представлено огляд стану досліджень у світі за тематикою дисертаційного дослідження. Зокрема, викладено результати досліджень щодо механічних, структурних і теплових властивостей металевих наночастинок, особливостей процесів масоперенесення в них в умовах температурного і деформаційного впливу.

У другому розділі описано методику проведених досліджень. Зокрема, наведено протоколи молекулярно-динамічного моделювання процесів масоперенесення в досліджуваних структурах, представлено схеми експериментальних установок для ультразвукової обробки.

В третьому розділі наведено оригінальні результати досліджень процесів масоперенесення та дефектоутворення в металевих системах під дією імпульсної обробки. Зокрема, визначено умови існування стабільних систем на основі срібла зі структурою нанотрубок. Змодельовано поведінку срібних нанотрубок і нанострижнів в умовах дії одновісної деформації та розраховано коефіцієнт теплового розширення в широкому інтервалі температур. В цьому ж розділі представлено результати досліджень масоперенесення в залізі під дією імпульсного навантаження.

В четвертому розділі наведено результати моделювання процесів атомної міграції в бінарних системах Al-Fe. Визначено роль дислокацій у вказаних процесах, взаємної кристалографічної орієнтації матеріалів.

В п'ятому розділі продемонстровано результати експериментальних досліджень процесів дифузії в алюмінієвому сплаві Д16 в умовах ультразвукової ударної обробки. В цьому розділі обговорюється вплив тривалості ультразвукової обробки на структуру і розміри легованого шару в приповерхневій області зразка.

Загалом, дисертаційна робота Солдатенко Оксани Михайлівни «Прискорене масоперенесення за рахунок рухомих дислокацій при імпульсному навантаженні» оформлена відповідно до вимог наказу МОН України від 12 січня 2017 р. № 40 «Про затвердження вимог до оформлення дисертації».

Оприлюднення результатів дисертаційної роботи

Наукові результати дисертації висвітлені у 13 наукових публікаціях здобувача, серед яких: 2 статті у наукових виданнях, включених на дату опублікування до переліку наукових фахових видань України; 4 статті у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у базах даних Web of Science

Core Collection та/або Scopus, та віднесених до першого - третього квартилів (Q1 - Q3) відповідно до класифікації SCImago Journal and Country Rank або Journal Citation Reports; 1 патент на винахід, що пройшов кваліфікаційну експертизу та безпосередньо стосується наукових результатів дисертації.

Також результати дисертації були апробовані на 8 наукових фахових конференціях.

Розгляд наукових публікацій, підготовлених за результатами дисертаційного дослідження, веде до висновку, що їх науковий рівень є високим, а основні висновки роботи відображені в опублікованих працях. Публікація результатів роботи в журналах, що передбачають процедуру анонімного рецензування, є додатковим свідченням того, що робота не містить проявів порушень академічної доброчесності. Крім того, результати дисертаційного дослідження неодноразово доповідалися на престижних наукових конференціях, тобто пройшли детальне обговорення серед фахівців в галузі матеріалознавства. Таким чином, наукові результати описані в дисертаційній роботі повністю висвітлені у наукових публікаціях здобувача.

Недоліки та зауваження до дисертаційної роботи.

1) Потенціал МЕАМ, що використовувався в роботі для молекулярно-динамічного моделювання, має декілька різних параметризацій для срібла та його сполук. Тому в розділі «Матеріали та методики досліджень» варто було б навести значення параметрів обраного потенціалу та обґрунтувати вибір саме цієї параметризації.

2) Фізична інтерпретація окремих важливих результатів проведена дещо поверхнево. Зокрема, в тексті роботи практично не наводяться детальні пояснення ефекту зменшення коефіцієнта лінійного теплового розширення срібних нанострижнів з температурою та його немонотонної залежності від діаметру стрижнів.

3) В роботі використовується не зовсім вдалий, на мій погляд, переклад назви міжатомного потенціалу МЕАМ - «метод втіленого атома». Доцільним видається використання більш поширеного в літературі терміну «метод зануреного атома». Крім того, для одного й того ж процесу в роботі використовуються різні терміни: «масоперенесення» та «масоперенос».

4) В розділі 5 два рисунки мають однакову нумерацію (рис. 5.10).

5) В тексті роботи та підписах до рисунків наявні опечатки: «металевих наночастинок» (2 стор., 4 абзац), «механічних властивостей» (4 стор., 1 рядок), «утворення дисокацій» (4 стор., 5 рядок), «межі роділу матеріалів» (4 стор., передостанній рядок), «проявляють фундаметально різні»

(31 стор., останній абзац), «двійникових границь наносрижня» (34 стор., 1 абзац), «в експериментальному дослідженні» (71 стор., 2 абзац), «дані, остримані авторами» (підпис до рис. 3.12), «Для порівняння також» (стор.73, останній абзац), «атомно-транспортних процесів» (79 стор., останній абзац), «6 атомних площин Al» (стор.101, останній абзац), «області, яка увесь час» (стор.108, 1 абзац), «Формування дифузійної зони в сплаві» (підпис до рис. 5.7 та рис. 5.8), «амно-транспортні процеси» (стор.115, останній абзац), «срібних наночасинок» (стор.116, висновок 3).

Вважаю, що висловлені зауваження не є визначальними і не зменшують загальну наукову новизну та практичну значимість результатів та не впливають на позитивну оцінку дисертаційної роботи.

Висновок про дисертаційну роботу

Вважаю, що дисертаційна робота здобувача ступеня доктора філософії Солдатенко Оксани Михайлівни на тему «Прискорене масоперенесення за рахунок рухомих дислокацій при імпульсному навантаженні» виконана на високому науковому рівні, не порушує принципів академічної доброчесності та є закінченим науковим дослідженням, сукупність теоретичних та практичних результатів якого розв'язує наукове завдання, що має істотне значення для галузі знань Механічна інженерія. Дисертаційна робота за актуальністю, практичною цінністю та науковою новизною повністю відповідає вимогам чинного законодавства України, що передбачені в п.6 – 9 «Порядку присудження ступеня доктора філософії та скасування рішення разової спеціалізованої вченої ради закладу вищої освіти, наукової установи про присудження ступеня доктора філософії», затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України від 12 січня 2022 р. № 44.

Здобувач Солдатенко Оксана Михайлівна заслуговує на присудження ступеня доктора філософії в галузі знань 13 Механічна інженерія за спеціальністю 132 Матеріалознавство.

Офіційний опонент:

Завідувач кафедри фізики металів
Київського національного університету
імені Тараса Шевченка,
кандидат фізико-математичних наук, доцент

М.П. « 22 » січня 2024 року

