РЕЦЕНЗІЯ

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.

Необхідність створення нових матеріалів з покращеними експлуатаційними характеристиками приводить як до модифікації функцій вже існуючих методів їх створення, так і до винайдення розробки принципово нових методик, в тому числі й нових методів досліджень.

Часто використовуваними є імпульсні методи обробки матеріалів шляхом прикладання знакозмінних напружень, коли деформаційні процеси призводять до диспергування структури поверхневих шарів оброблюваних матеріалів, і роль поверхні в таких умовах набуває вагомого значення. До таких методів можна віднести дробоструменеву обробку, ультразвукову ударну обробку, лазерну обробку, електро-іскрове легування та ін.

Одним із найпопулярніших напрямків створення нових матеріалів є розробка нанорозмірних кристалічних структур, серед яких найбільш впізнаваними на сьогоднішній день є нанотрубки та фулерени. Зокрема, вуглецеві нанотрубки зробили революцію в науковій сфері. Пізніше і багато інших наноструктур, таких як нанокластери різної форми, нановолокна, нанострижні та металеві нанотрубки здобули широкого прикладного значення як альтернативні матеріали в різних областях. На сьогоднішній день широкого застосування набули нанострижні срібла та золота різної будови і геометрії. Ще одним прикладом нановимірних матеріалів з широким застосуванням є наноплівки – двовимірні наноструктури з широким прикладним значенням. Однією з особливостей нанорозмірних об'єктів є велика кількість атомів на поверхні, в порівнянні з кількістю атомів в об'ємі, що приводить до виникнення в таких структурах додаткових напружень, внаслідок чого властивості матеріалу можуть сильно відрізнятись від тих, що притаманні макроскопічним об'єктам.

Найкращим інструментом для проведення досліджень є комп'ютерне моделювання, яке дає змогу отримати результати, без необхідності проведення експериментальних. Саме завдяки моделюванню можна вивчати процеси, які

протікають в матеріалах в умовах імпульсного ударного навантаження, а саме, механізми деформації та аномального масоперенесення на атомному рівні.

Оцінка обгрунтованості наукових результатів дисертації, їх достовірності та новизни.

Наукова новизна результатів дисертаційного дослідження полягає в наступному:

1. Запропоновано метод керування коефіцієнтом лінійного теплового розширення чистого металу за рахунок зміни його структури шляхом модифікації поверхні, встановивши можливість існування наночастинок срібла зі сталим температурним коефіцієнтом розширення в інтервалі температур 150 К – 450 К.

2. З'ясовано атомний механізм аномального масоперенесення в ОЦК ґратці заліза і поблизу межі розділу металів з різним типом кубічної ґратки внаслідок імпульсної деформації. Він полягає в тому, що поля напружень рухомих крайових дислокацій взаємодіють з полями напружень навколо міжвузлових атомів (МА), що приводить до руху МА в бік ядра дислокації, і в подальшому така дислокація продовжує свій рух з наявним міжвузловим атомом у її ядрі. Якщо лінія утвореної в процесі деформації дислокації перпендикулярна до границі розділу, то МА з одного матеріалу по ядру дислокації рухатимуться в бік границі розділу, де потраплятимуть в область впливу ядра дислокації іншого матеріалу і продовжуватимуть свій рух по дислокаційній лінії в об'єм іншого матеріалу. За рахунок цього поблизу границі розділу утворюється перехідна зона з плавною зміною концентрації елементів.

Наукові дослідження були виконані здобувачем на кафедрі фізичного матеріалознавства та термічної обробки КПІ ім. Ігоря Сікорського в рамках держбюджетної теми № 2405ф «Структурно-фазові механізми керування комплексом поверхневих властивостей конструкційних і функціональних сплавів комбінованими тепловими, іонними та деформаційними впливами» (0121U109752) та в рамках науково-дослідних програм МОН України «Динамічні явища на поверхнях розмежування металічних матеріалів під імпульсними навантаженнями» (0117U002133) і ««Нерівноважні транспортні явища у матеріалах із шаруватою структурою» (0122U002366) під керівництвом доцента, д.ф.-м.н., старшого наукового співробітника Філатова Олександра Валентиновича.

Отже, в дисертаційній роботі поставлене наукове завдання «з'ясування механізмів дефектоутворення та міграції атомів у приповерхневих шарах металів з кубічною ґраткою в умовах імпульсного і знакозмінного навантаження для розробки нового класу матеріалів з унікальними властивостями та розробки рекомендацій щодо режимів обробки

конструкційних матеріалів з ціллю покращення їх фізико-технічних характеристик» виконано повністю, здобувач повною мірою оволоділа методологією наукової діяльності.

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

За своїм змістом дисертаційна робота здобувача Солдатенко О. М. 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 «Комп'ютерне моделювання фізичних процесів у твердих тілах».

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.

Дисертація складається з вступу, 5 розділів, висновків, списку літератури та додатків. Загальний обсяг дисертації 126 сторінок. В дисертаційній роботі послідовно та доступно викладені результати проведених досліджень, з використанням загальноприйнятної термінології та проаналізовано сучасні англомовні публікації.

У вступі обґрунтовано актуальність роботи, сформульовано мету дослідження і задачі, вирішення яких необхідне для її досягнення, описано наукову новизну і практичне значення отриманих результатів. Наведено інформацію щодо зв'язку роботи з науковими темами, грантами та міжнародними проєктами, а також відносно апробації її результатів. Зазначено особистий внесок здобувача до публікацій, в яких викладено основний зміст роботи.

У першому розділі проведено аналіз сучасних літературних джерел щодо властивостей однокомпонентних металевих наночастинок, способів їх дослідження, а також їхнього практичного застосування, впливу температури та деформації на процеси масопереносу в металах і методів покращення властивостей матеріалів шляхом деформаційної та хімічної модифікації поверхні

У другому розділі описані методики молекулярно-динамічного моделювання нанокристалів срібла, молекулярно-динамічного моделювання процесу механоактивованої дифузії в залізі та проведення ультразвукової ударної обробки.

В третьому розділі описаний механізмам дефектоутворення і масоперенесення в металах з кубічною ґраткою під впливом імпульсного навантаження. Проаналізовано вплив частки поверхневих атомів в наностржнях і нанотрубках на стабільність і механічні властивості ГЦК металів на прикладі срібла.

В четвертому розділі досліджено процеси міграції атомів крізь границю розділу та структурні зміни поблизу неї в бінарній системі Al-Fe в умовах дії імпульсного навантаження.

П'ятий розділ присвячено дослідженню деформаційно-дифузійних процесів в алюмінієвому сплаві Д16 при механічному легуванні його поверхні методом ультразвукової ударної обробки.

Дисертаційна робота 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: 4 статті у періодичних наукових виданнях, проіндексованих у базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus, з яких 4 статті у виданнях, віднесених до першого — третього квартилів (Q1—Q3) відповідно до класифікації SCImago Journal and Country Rank або Journal Citation Reports; 1 патент на винахід, що пройшли кваліфікаційну експертизу та безпосередньо стосуються наукових результатів дисертації.

Також результати дисертації були апробовані на 8 наукових фахових конференціях.

Публікація результатів дисертаційної роботи у виданнях, проіндексованих у базах даних Web of Science Core Collection та Scopus, особливо в англомовних, а також отриманий патент на винахід підтверджують високий рівень проведених в дисертаційній роботі досліджень, їх актуальність, а також дотримання принципів академічної доброчесності при публікації результатів проведених досліджень.

Особистий внесок здобувача в наукових роботах, опублікованих у співавторстві полягає в наступному: побудова молекулярно-динамічних моделей срібних наностржнів та розрахунок коефіцієнтів лінійного теплового розширення; побудова молекулярно-динамічної моделі та розрахунки коефіцієнтів масопереносу; аналіз розподілу хімічних елементів за глибиною

досліджуваних зразків та атомістичне моделювання двокомпонентної системи Al-Fe з границею розділу.

У патенті на винахід Солдатенко О. М. проведено розрахунок температурних коефіцієнтів розширення, пошук найближчих аналогів та опис винаходу.

Таким чином, наукові результати описані в дисертаційній роботі повністю висвітлені у наукових публікаціях здобувача.

Недоліки та зауваження до дисертаційної роботи.

1) Однією з головних причин всіх ефектів на нанорівні, які спостерігалися в цій роботі, є вплив вільної поверхні. В роботі це було досить добре продемонстровано і отримані результати не протирічать загальновідомим і усталеним фізичним уявленням. Але вважаю, що саме питанню впливу вільної поверхні не було приділено достатньої уваги. Вплив вільної поверхні не розповсюджується на один атомний шар від поверхні, він глибший і при тій геометричній конфігурації об'єктів, які були досліджені в роботі, не є однорідним по поверхні. Це майже не можливо дослідити практично на реальних фізичних об'єктах, але цілком можливо зробити методами, які були використані в роботі.

2) Наявність вільної поверхні, окрім структурних змін, також приводить до виникнення напружень в області впливу. Саме ці напруження і впливають на температурну стабільність срібних нанооб'єктів та їх теплові властивості. Це було продемонстровано, але значення (чи хоча б приблизний рівень) цих напружень не були розраховані. А це б дало змогу порівнювати і прогнозувати властивості таких нанооб'єктів отриманих з інших матеріалів.

3) Описана методика для теоретичного розрахунку коефіцієнтів дифузії, яка використовувалась в даній роботі передбачає розрахунок цих коефіцієнтів як в одному напрямку, так і в цілому по об'єму з урахуванням руху у всіх напрямках. Але з представлених результатів розрахунку коефіцієнтів дифузії в ОЦК залізі під дією деформації не зовсім зрозуміло, як саме вони розраховувались – з урахуванням всіх напрямків, чи тільки в напрямку деформаційного впливу, чи в напрямку руху дислокацій? Чи був проаналізований тензор коефіцієнтів дифузії? Який переважний напрямок коефіцієнта дифузії для випадку співпадіння напрямку деформаційного впливу і напрямку руху дислокацій і його неспівпадіння?

4) В розділі 5 описані процеси в алюмінієвому сплаві Д16, які протікають при механічному легуванні методом ультразвукової ударної обробки (УЗУО) залізним бойком. УЗУО проводилась на повітрі при тривалості 90 с та 180 с, проте в тексті дисертації не наведено обґрунтування вибору саме такої тривалості і середовища обробки. Відомо, що в процесі УЗУО на повітрі,

алюмінієвих сплавів відбувається дифузія атомів кисню в поверхневий шар, але в роботі про це нічого не сказано.

5) Наприкінці розділу 5, на сторінці 115 робиться висновок про зменшення коефіцієнту дифузії зі зростанням тривалості обробки з посиланням на рис.5.11, але в тексті дисертації останній рисунок 5.10.

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.

Рецензент:
доцент кафедри фізичного
матеріалознавства та
термічної обробки
НН ІМЗ ім. Є.О. Патона,
к.т.н., доцент _____ Андрій БУРМАК

«22» січня 2024 року

Підпис А. П. Бурмака засвідчую