

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.

Виготовлення різноманітних деталей та елементів з'єднання тощо, супроводжується різними методами деформаційної обробки включно з прикладанням імпульсних знакозмінних напружень, які призводять аж до нанорозмірного диспергування приповерхневих шарів оброблюваних масивних матеріалів. При цьому процеси деформації і пов'язані з ними процеси масоперенесення зароджуються на поверхні та найбільш інтенсивно протікають в приповерхневих шарах оброблюваного матеріалу або на границях зерен, межах розділу фаз, що дуже схоже на протікання подібних процесів у наноматеріалах, де вклад поверхні дуже суттєвий, а процеси, що відбуваються в усьому об'ємі наночастинки, подібні до процесів, що протікають в приповерхневій області макрооб'єкту. Розуміння цих процесів особливо важливе для створення срібних наострижнів, нанотрубок і двовимірних наноплівочок, які широко використовуються в нанoeлектроніці та в схемах сонячних джерел струму. Тому вивчення процесів масоперенесення, яке дуже істотно впливає на властивості таких елементів, є ефективним завдяки з'ясуванню механізмів переміщення атомів при масоперенесенні. Оскільки їх неперервне експериментальне дослідження в процесі обробки є практично не доступним, то завдяки комп'ютерному моделюванню методом молекулярної динаміки на атомному рівні можна дослідити фундаментальні процеси, що відбуваються в матеріалах в умовах імпульсного деформування, а саме, механізми деформації та прискореного масоперенесення. Підтвердженням цього є отримані в роботі аномальні температурні залежності коефіцієнтів термічного розширення в нанострижнях срібла, тощо. Тому вважаю, що тема виконаної дисертаційної роботи є актуальною.

Оцінка обґрунтованості 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 K – 450 K». Цю новизну автор сформулювала ґрунтуючись на моделюванні зміни структури срібла шляхом модифікації його поверхні і розрахунках вказаних коефіцієнтів апробованим методом молекулярної динаміки з використанням надійних потенціалів міжатомної взаємодії, що забезпечило її достовірність та обґрунтованість.
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 (наявними або утвореними внаслідок імпульсного впливу), 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». Ця широко розгорнута новизна відображає розраховані особливості масоперенесення на основі моделі захоплення міжвузлових атомів ядрами дислокацій і їх переміщення через границю розділу металів з різними ґратками вздовж перпендикулярних до неї ліній дислокацій підтверджена експериментально мікрорентгеноспектральним дослідженням розподілу атомів заліза і алюмінію після ультразвукової ударної обробки залізним бойком сплаву Д16. Разом з надійністю результатів, які отримуються молекулярною динамікою це забезпечує достовірність і обґрунтованість 2-ї новизни.

Наукові дослідження були виконані здобувачем на кафедрі Фізичного матеріалознавства та термічної обробки КІП ім. Ігоря Сікорського в рамках держбюджетної теми КІП ім. Ігоря Сікорського № 2405ф «Структурно-фазові механізми керування комплексом поверхневих властивостей конструкційних і функціональних сплавів комбінованими тепловими, іонними та деформаційними впливами» (0121U109752) під керівництвом професора,

доктора фізико-математичних наук, професора Волошко Світлани Михайлівни. Інша частина роботи виконувалась в рамках тем «Динамічні явища на поверхнях розмежування металічних матеріалів під імпульсними навантаженнями» (0117U002133) та «Нерівноважні транспортні явища у матеріалах із шаруватою структурою» (0122U002366) відповідно до науково-дослідних програм МОН України під керівництвом доцента, доктора фізико-математичних наук, старшого наукового співробітника Філатова Олександра Валентиновича.

Отже, в дисертаційній роботі поставлене наукове завдання з'ясувати механізми прискореного масоперенесення за рахунок рухомих дислокацій при імпульсному навантаженні, для чого необхідно: 1) З'ясувати механізми дефектоутворення в наноструктурах з ГЦК ґраткою в умовах деформації. 2) Дослідити атомні механізми масопереносу в умовах імпульсної деформації в металах з кубічною ґраткою. 3) Визначити способи впливу на механічні, теплові та дифузійні властивості матеріалів, шляхом зміни їхньої структури. 4) З'ясувати закономірності формування структури і складу матеріалів з різною ґраткою поблизу границі їх розділу в умовах знакозмінного деформування. Наукове завдання 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 «Наномасштабні та наноструктуровані системи».

Розглянувши звіт подібності за результатами перевірки дисертаційної роботи на текстові співпадиння, можна зробити висновок, що дисертаційна робота «Прискорене масоперенесення за рахунок рухомих дислокацій при імпульсному навантаженні» є результатом самостійних досліджень здобувача Солдатенко Оксани Михайлівни 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.

Текст дисертації викладений з логічною послідовністю так, що усі наступні речення, зміст абзаців і пунктів впливають з попередніх тверджень і

не суперечать один одному. Разом з використанням загальноприйнятої наукової термінології, української лексики та відсутності жаргону, це забезпечує доступність і розуміння пояснень та формулювань суті отриманих результатів досліджень. Чіткі конструкції речень з малою кількістю зворотів, мінімумом повторів, завдяки використанню синонімів, сприяють легкому сприйняттю змісту дисертації.

Дисертація складається з вступу, 5 розділів, висновків, списку літератури. Загальний обсяг дисертації – 126 сторінок.

У **вступі** відмічено, що для досягнення тих чи інших фізико-технічних характеристик виробів використовуються імпульсні методи обробки матеріалів шляхом прикладання знакозмінних напружень, коли деформаційні процеси призводять до диспергування структури приповерхневих шарів оброблюваних матеріалів, близьких до поведінки та характеристик наноструктурних об'єктів і роль поверхні в таких умовах набуває вагомого значення. Тому, для свідомого керування масоперенесенням і деформаційним впливом під час імпульсної деформації в металах, постає необхідність дослідження деформаційних і транспортних процесів на атомному рівні в нанорозмірних стрижнях, трубках, тощо. Ґрунтуючись на необхідності з'ясування процесів, які лежать в їх основі, обґрунтована актуальність проведених в роботі досліджень, сформульовані мета і задачі досліджень та наукова новизна отриманих результатів, показаний зв'язок роботи з науковими темами, програмами, висвітлені практичне значення одержаних результатів, особистий внесок здобувача, вказані публікації за результатами дисертаційної роботи і структура та обсяг дисертації.

У **першому** розділі проведено літературний огляд, в якому проведений аналіз літературних джерел, що стосуються теми дисертації. Так в п.1.1 розглянуті основні процедури обчислювального матеріалознавства, які визначають необхідні 5 етапів для отримання із створених моделей систем та притаманних їм процесів наукових результатів, що узгоджуються з даними інших досліджень та експериментів. Відмічено місце молекулярно-динамічного моделювання (МДМ) серед великого спектру методів дослідження та можливість прогнозування поведінки властивостей матеріалів при зміні термодинамічних умов та механічних навантажень, особливо в нанорозмірних системах. В п.1.2 проаналізована відмінність залежності коефіцієнту лінійного теплового розширення (КЛТР) в масивних металах та в нанорозмірних стрижнях різних розмірів. Поряд з цим розглянута відмінність реакції макроскопічних монолітних металів і наночастинок на прикладену деформацію розтягу. Проаналізовані результати синтезу срібних нанострижнів та нанотрубок і їх механічних властивостей. Розглянуті в п.п. 1.3.і 1.4 літературні дані наукових результатів про вплив температури та деформації на процеси

масопереносу в металах і покращення властивостей матеріалів шляхом обробки поверхні дозволили автору зробити висновок, що *вивчаючи методом (МДМ) процеси дефектоутворення в нанорозмірних об'єктах та їхні механічні властивості можна прогнозувати, які процеси протікатимуть та якими характеристиками володітимуть приповерхневі шари макроскопічного об'єкту в умовах, що призводять до його наноструктуризації.*

У другому розділі описано методики молекулярно-динамічного моделювання нанокристалів срібла для дослідження їхніх теплових та механічних властивостей з використанням потенціалу на основі методу втіленого атома для системи Ag–Cu та вказано обґрунтування вибору срібних наноструктур: тому, що уже відомо про їх практичне застосування, а властивості їхніх форм достатньо широко досліджені теоретично. Слід відзначити, що дисертант лаконічно але повно описала методики моделювання окремо срібних нанотрубок з графено- і ГЦК-подібними стінками, товстостінних циліндричних нанотрубок та нанострижнів. Важливо, що для коректного комп'ютерного моделювання кожного зразка, застосовувався, описаний в цьому розділі, спосіб визначення рівноважних параметрів ґратки, при кожній з досліджуваних температур з кроком 100 K в діапазоні 50–1050 K, які були стартовими при розрахунках властивостей в інших термодинамічних та механічних умовах. Також вказаний вибір граничних умов, фіксації крайніх атомних площин. Коротко вказані методики моделювання процесу деформації срібних нанотрубок і нанострижнів та спосіб розрахунку коефіцієнта лінійного теплового розширення. В п.2.2 детально розглянута методика молекулярно-динамічного моделювання процесу механоактивованої дифузії в залізі, яка включає вибір ЕАМ-потенціалу міжатомної взаємодії для трикомпонентної системи Cu–Fe–Ni, параметрів розрахункової комірки, початкових та граничних умов. Варто відмітити, що для спостереження за процесами механоактивованої дифузії, в зразку додатково створювались крайові дислокації та власний міжвузловий атом. Важливим для розрахунку коефіцієнтів масопереносу в процесі дефектоутворення та міграції атомів на границі розділу Al–Fe під впливом зовнішньої деформації є моделювання розрахункових комірок, що складались з шару ГЦК-алюмінію та ОЦК-заліза у вигляді двох систем орієнтації ґраток Fe і Al так, щоб площини найлегшого ковзання дислокацій в кожній окремій ґратці співпадали, тобто були перпендикулярними і паралельними до границі розділу. Повноту описання методики виконаної роботи забезпечують також розглянуті параметри ультразвукової обробки та мікроструктурного і хімічного аналізів.

У третьому розділі представлені результати дослідження дефектоутворення та масоперенесення в металах з кубічною ґраткою під впливом імпульсного навантаження. Зокрема в п.3.1.1 вартою уваги є

встановлена залежність температурних меж стабільності срібних нанострижнів від їх діаметрів. При цьому втрата стабільності супроводжується деформацією нанострижня як вздовж осі нанооб'єкта, так і в перпендикулярних до неї напрямках, що приводить до зміни форми поперечного перерізу, тоді як графеноподібна срібна нанотрубка з відстанню між найближчими атомами в площині нанотрубки, яка дорівнює періоду ГЦК ґратки срібла ($a = 4,09 \text{ \AA}$), в процесі релаксації деградує з розпаданням на менші структурні елементи уже за температури 300 К, а зменшення міжатомних відстаней до $2,892 \text{ \AA}$ спричиняє її стискання вздовж осі та зникнення в ній порожнини. Важливість цих результатів полягає в тому, що визначені способи утворення і орієнтації осей багатостінних нанотрубок дозволяють з'ясувати межі їх стабільності, знання яких необхідні для синтезу і використання. Цікавим є те, що локальне звуження багатостінної нанотрубки з віссю орієнтованою в $[110]$ -напрямі виникає біля її кінця аж при 10%-й відносній деформації. Варто відзначити, що визначений автором модуль Юнга нанотрубки більший ніж нанострижня з однаковим ефективним діаметром при однаковій границі пружності свідчить про більшу міцність коротших поверхневих міжатомних зв'язків, що також підтверджується меншим значенням максимальної пружної деформації нанотрубки. Важливими для експлуатації в змінних температурних умовах срібних нанотрубок і нанострижнів (п.3.1.4) є отримані їх температурні залежності коефіцієнтів лінійного теплового розширення (КЛТР), які зменшуються при зростанні температури. Виявлене збільшення швидкості зниження КЛТР з підвищенням температури, внаслідок зростання відсоткового вмісту поверхневих атомів нанострижнів, дозволило автору визначити частку поверхневих атомів, при якій КЛТР не залежить від температури. Завдяки цьому був отриманий патент на винахід №127523. В п.3.2 представлено з'ясований атомний механізм аномального масоперенесення в ОЦК ґратці заліза внаслідок імпульсної деформації зі швидкістю 10^8 с^{-1} , завдяки взаємодії полів напружень рухомих крайових дислокацій з полями напружень навколо міжвузлових атомів, що приводить до руху МА в бік ядра дислокації, і в подальшому така дислокація продовжує свій рух з наявним міжвузловим атомом у її ядрі. *Значний практичний інтерес викликає майже незалежність від температури (рис.3.22) високих значень коефіцієнту самодифузії α -заліза під впливом імпульсного навантаження, оскільки це дає можливість керувати дифузійними процесами, уникаючи нагріву матеріалу, або прискорювати дифузійні процеси в умовах невисоких температур.*

У четвертому розділі вивчена міграція атомів крізь границю розділу та структурні зміни поблизу неї в бінарній системі Al-Fe в умовах дії імпульсного навантаження на основі моделювання переміщення дислокацій та дифузії атомів між металами з різними кубічними ґратками – ГЦК-Al і ОЦК-Fe. Слід

відзначити, що дослідження проводилось для двох систем орієнтації кристалів, в яких (система 1) площини найлегшого ковзання дислокацій (площина (112) для ОЦК заліза та площина (111) для ГЦК алюмінію) у кожному з шарів паралельні границі розділу, а в системі 2 ці площини орієнтувались перпендикулярно до границі розділу кристалів. Важливо відмітити, що такий вдало вибраний підхід дозволив автору виявити в 1-й системі диспергування структури шару кристалу заліза, бо із збільшенням тривалості деформації кількість дислокацій біля границь розділу зростає, що в подальшому приводить до утворення наддислокацій, чого не спостерігається в шарі Al впродовж реалізованого в моделюванні часу. У другому випадку орієнтацій площин не спостерігається суттєвого подрібнення структури шару заліза, оскільки дислокації, які утворюються в шарі Fe, рухаються по площинах найлегшого ковзання до границі розділу, внаслідок чого їх концентрація в об'ємі шару зменшується і стає недостатньою для утворення дислокаційних комплексів - наддислокацій, та подрібнення структури. Ці результати дозволяють проводити свідомий орієнтаційний вибір кристалів при їх з'єднанні і обробці, оскільки його якість істотно залежить від характеристик масопереносу.

У п'ятому розділі експериментально досліджені деформаційно-дифузійні процеси в алюмінієвому сплаві Д16 при механічному легуванні методом ультразвукової ударної обробки залізним бойком, які виявили, методом енергодисперсійної рентгенівської спектроскопії поперечного перерізу зразків сплаву Д16, формування дифузійної зони, ширина якої зростає вдвічі при збільшенні в 2 рази тривалості обробки. При цьому визначені коефіцієнти дифузії свідчать, що зменшення коефіцієнту взаємної дифузії зі збільшенням тривалості обробки може свідчити про зростання кількості дислокацій поблизу границі розділу легovanого шару і основи сплаву Д16, внаслідок чого їх рухливість погіршується і атомно-транспортні процеси на границі розділу сповільнюються. Ці експериментальні дослідження підтверджують результати моделювання процесів масопереносу, чим засвідчують важливість проведених в дисертації розрахунків.

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: 0 статей 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, з яких 4 статті у виданнях, віднесених до

першого — третього кuartилів (Q2 і 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; 0 патентів України на корисну модель; 0 одноосібних монографій, що рекомендовані до друку Вченою радою КПІ ім. Ігоря Сікорського та пройшли рецензування.

Також результати дисертації були апробовані на 8 наукових фахових конференціях.

Високий науковий рівень публікацій здобувача забезпечений ґрунтовним рецензуванням в періодичних виданнях, проіндексованих у базах даних Scopus, що відносяться до другого і третього кuartилів (Q2 і Q3). Про дотримання в наукових публікаціях принципів академічної доброчесності свідчить висновок про оригінальність дисертації, поданої на здобуття ступеня доктора філософії здобувача Солдатенко Оксани Михайлівни в дисертації на тему «Прискорене масоперенесення за рахунок рухомих дислокацій при імпульсному навантаженні», згідно звіту подібності схожість-3,82%, цитат-0, вилучень-0.

Особистий внесок здобувача до всіх наукових публікацій, опублікованих із співавторами та зарахованих за темою дисертації полягає в наступному: у роботах [12, 17] здобувач здійснила побудову молекулярно-динамічних моделей срібних нанострижнів та розрахунки коефіцієнтів лінійного теплового розширення; у роботі [59] здобувач побудувала молекулярно-динамічну модель та здійснив розрахунки коефіцієнтів масопереносу; в роботі [63] здобувачем був проведений аналіз розподілу хімічних елементів по глибині досліджуваних зразків та зроблено атомістичне моделювання двокомпонентної системи Al-Fe з границею розділу. У патенті на винахід [58] здобувач провела розрахунок температурних коефіцієнтів розширення, пошук найближчих аналогів та опис винаходу. Окрім того, у всіх роботах здобувач брала участь в обговоренні результатів, оформленні матеріалів і підготовці текстів публікацій.

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

Недоліки та зауваження до дисертаційної роботи.

1. З аналізу тексту дисертації незрозуміло, чи можна використовувати запропонований метод керування коефіцієнтом лінійного теплового розширення чистого металу за рахунок зміни його структури шляхом модифікації поверхні до інших металів з іншими структурами і характеристиками міжатомної взаємодії, чи це стосується лише срібла.
2. 2-а новизна дуже розширена так, що дещо розмита її суть. Як на мене, то її можна сформулювати так: «Показано, що внаслідок взаємодії полів напружень рухомих крайових дислокацій і напружень в околі

міжвузлових атомів, останні (МА) переміщуючись в ядра дислокацій рухаються разом з ними. Тому при утворенні дислокацій, лінії яких перпендикулярні до меж розділу різних матеріалів, рухомі по їх ядрах МА потраплятимуть в області впливу ядер дислокацій прилеглого матеріалу, рухаючись в його об'єм по лініях його ж дислокацій».

3. З опису потенціалу ЕАМ (стор. 39) не видно, як визначались щільності електронів на різних ділянках конкретних модельованих срібних наноструктур для запуску молекулярно-динамічного обчислення.
4. На стор.45 вказано, що «При дослідженні коефіцієнтів лінійного теплового розширення до наночастинок в напрямку їх осі застосовувались періодичні граничні умови», але нічого не сказано про їх параметри, зокрема величину періодів, тощо.
5. В дисертації не з'ясований механізм зміни ангармонізму внаслідок збільшення частки поверхневих атомів в нанострижнях, що спричиняє важливі температурні залежності КЛТР
6. На стор. 81 використано незрозумілий термін в реченні «Наявність деформації та *високого поля напружень* приводить до....» можливо це *поле високих напружень*.
7. *Технічні зауваження.* стор.2, абзац 4, рядок 3 замість наночастинок требанок; стор. 6 щов—>що в; 2-абзац 7-й рядок щов—>що в, кінець 6-го рядка пропущені слова «при обробці»; стор.17 2-й абзац русизм «із-за малих розмірів» треба замінити на «через малі розміри»; стор. 24, 2-й абзац, 2-й рядок замість «взаємодії» має бути «взаємодією»; на стор.29 порушена послідовність пунктів внаслідок повторення п.1.1; в останньому рядку на стор.53 треба розділити слова «об'єміалюмінію»; на стор. 67 в останньому абзаці посилаються на рис. 3.8 замість рис. 3.9; на рис.3.10 не розшифроване позначення ϵ ; на рис.3.21 не розшифровані позначення V_c та V_D і не вказане значення F/L і D ; в 1-му абзаці на стор.87 вказані «високі значення коефіцієнтів дифузії....» з посиланням на праву частину рис.3.20, тоді як ці значення наведені на рис. 3.22; на рис. 3.23 треба було би для наукового загалу розшифрувати, що означають позначення $1E+09$ $2E-12$... ; на стор.115 є посилання на рис.5.11, хоч він позначений як 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 13 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:

Професор кафедри
високотемпературних матеріалів
та порошкової металургії,
доктор фізико-математичних
наук, професор


Ярослав ЗАУЛИЧНИЙ



« 22 » січня 2024 року

Підпис Я. В. Зауличного засвідчую 