

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу
Григорьевой Полины Михайловны на тему «Влияние деформаций высокопрочных конструкционных материалов на транспорт водорода из внешней среды», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.8 (ранее 01.02.04) – механика деформируемого твердого тела

Актуальность темы диссертации.

Разработка моделей, которые могут адекватно учитывать влияние напряженно-деформированного состояния на процессы диффузии в твердых телах, до сих пор представляет собой научный интерес. В частности, одной из таких проблем, наиболее важных для современной промышленности, является задача о транспорте водорода внутрь высокопрочных конструкционных материалов. Постоянно растущие требования к прочности таких материалов требуют более точного прогнозирования остаточного ресурса конструкций, находящихся в условиях эксплуатации в агрессивной среде. Поверхностные эффекты и локальные изменения концентрации диффундирующего газа начинают играть все более существенную роль. Таким образом, описание возникновения насыщенного водородом приповерхностного слоя является важным шагом для дальнейшего развития более точных решений проблем водородной хрупкости. Большое количество существующих моделей зачастую описывают лишь некоторые частные эффекты, а ограниченность их применимости не позволяет использовать их в комплексных задачах о диффузии водорода внутрь металлов. Кроме того, существующие экспериментальные данные показывают, что зачастую для точного описания локальных изменений концентрации учет лишь одного канала диффузии недостаточен. В связи с этим, представляется актуальным решение связанных задач диффузии, которые будут учитывать различные механизмы транспорта и перераспределения водорода в металлах. Рассматриваемая диссертация посвящена решению и анализу именно таких задач, и нацелена на изучение влияния напряженно-деформированного состояния твердого тела и ловушечных эффектов на транспорт водорода внутрь этого тела.

Результаты диссертационной работы, их достоверность и научная новизна.

Наиболее значительными новыми результатами диссертации являются:

1. Исследовано влияние диффузии под действием напряжений на скорость распространения фронта химической реакции. Для описания этих процессов использована модель тензора химического сродства, а также рассмотрена зависимость коэффициента диффузии от механических нагрузок. На основе сформулированной модели зависимости коэффициента диффузии от компонент тензора деформаций решены краевые задачи и исследована кинетика распространения фронта химической реакции в зависимости от приложенных внешних нагрузок в случае плоского, сферического и цилиндрического фронта.
2. Для определения энергии связи водорода в гидриде титана проведены экспериментальные исследования экстракции водорода из порошка гидрида титана. На основании экспериментальных данных методом горячей вакуумной экстракции водорода построены спектры термодесорбции при ступенчатом изменении температуры. При использовании модели Киссинджера, согласно которой распад твердого тела является химической реакцией первого порядка, построены зависимости Аррениуса, из которых были определены значения энергии связи.
3. В рамках линейной неравновесной термодинамики разработана новая модель диффузии газовой компоненты в твердое тело при термомеханическом нагружении. Получено уравнение локального баланса диффузионной составляющей, учитывающее зависимость процесса диффузии от напряженно-деформированного состояния твердого тела; концентрации газовой составляющей внутри него и других термомеханических характеристик. Это уравнение было специфицировано на случай транспорта водорода в металлы из внешней среды, были исследованы влияния напряжений в линейно упругой постановке. Модель специфицирована для случая диффузии водорода в металлы.
4. Проведен анализ влияния напряженно-деформированного состояния и вклада диффузии по ловушкам на примере решения двух краевых задач: осесимметричной задачи о растяжении кругового цилиндра при диффузии водорода через свободную поверхность и плоской задачи о полубесконечной трещине с закругленной вершиной при наличии диффузионного потока через поверхность трещины. Разработаны, построены и апробированы численные методы решения связанных краевых задач диффузии.
5. Разработан и реализован комплексный подход к описанию наблюдаемого в экспериментах образования и поведения, насыщенного водородом, поверхностного слоя в металлах.

Достоверность полученных результатов достигается благодаря корректному использованию математического аппарата и строгой математической постановке задач. Кроме того, были проведены предельные переходы к известным решениям в случае аналитического решения задач, а численные решения были сравнены с результатами точных аналитических решений для случаев, допускающих предельный переход к этим решениям.

Ценность для науки и практики.

Результаты научной работы представляют собой как теоретическую, так и практическую значимость.

С теоретической точки зрения результаты диссертации вносят значительный вклад в развитие моделей и методов исследования процессов, связанных с водородной деградацией эксплуатируемых высокопрочных конструкционных материалов. Общность подходов, которые использовались для описания приповерхностного наводороженного слоя, позволяют в будущем не только учитывать дополнительные эффекты, сопровождающие транспорт водорода внутрь металлов, но и использовать их для исследования массопереноса в твердых телах. Отдельно стоит отметить исследование влияния выбора ловушечной модели на распределение водорода внутри металла, что в дальнейшем позволит значительным образом улучшить существующие подходы к решению задач о водородной деградации металлов.

С практической точки зрения результаты диссертации важны для более полного понимания процессов, происходящих при реальных случаях водородной деградации конструкционных материалов. Все численные результаты получены при использовании конкретных значений металлов. Кроме того, результаты первой и второй глав могут быть использованы при оценке эксплуатационного ресурса конструкций, подверженных воздействию водорода, при определении способов хранения и транспортировки изотопов водорода.

Апробация работы.

Основное содержание диссертации изложено в 10 опубликованных работах автора, из которых 2 в изданиях, входящих в перечень ВАК, 6 – в базы данных Scopus и Web of Science. Содержание также полно отражено в автореферате.

Результаты работы докладывались на одиннадцати международных и российских конференциях по профилю механики деформируемого твердого тела.

Работа выполнялась в рамках проектов РФФИ и РНФ, результаты которых проходят полноценную научную экспертизу.

Замечания по работе.

1. На стр. 28 автор пишет: «Таким образом, можно сделать вывод, что деформации и напряжения могут влиять на диффузию только, через параметр a » и «Параметр a определяет, насколько легко молекулы газа могут диффундировать. Следовательно, это зависит от расстояния между зернами». Во-первых, неясно почему речь идет о молекулах газа, тогда как хорошо известно, что в металлах водород диффундирует в виде атомов (протонов, экранированных электронным газом), а не в виде молекул, которые не обладают диффузионной подвижностью. Во-вторых, непонятно, почему по мнению автора влияние напряжений на диффузионную подвижность водорода осуществляется только через изменение межзеренного пространства, тогда как диффузия водорода происходит не только по границам зерен, но и через тело (кристаллическую решетку) зерна. Очевидно, что изменение межатомного расстояния, связанное с приложением внешних напряжений, также должно оказывать влияние на скорость диффузии водорода.
2. В работе не предпринята попытка экспериментальной проверки или сопоставления с литературными данными результатов теоретического описания влияния напряжений и деформаций на коэффициент диффузии водорода, а также скорость распространения фронта химической реакции, контролируемой притоком водорода, что оставляет открытым вопрос о достоверности результатов проведенных теоретических изысканий.
3. В таблице 2 не приведены погрешности измерения концентраций водорода, что не позволяет оценить значимость отличий между значениями, полученными для разных материалов. Кроме того, в работе не указано, какое количество образцов каждого материала было исследовано, что затрудняет оценку воспроизводимости полученных результатов.
4. В главе 2 при обсуждении результатов анализа термодесорбции водорода из порошков гидрида титана автор не рассматривает фазовые превра-

щения, которые, вероятно, протекают в материале при его нагреве и могут оказывать влияние на энергию активации выхода водорода. В частности, в работе [Jiménez C. et al. Acta Mat. 59. 2011, 6318-6330] было убедительно показано, что появление второго пика на экстракционной кривой водорода совпадает с фазовым превращением $\delta \rightarrow \beta$. Кроме того, автор утверждает, что исследуемые порошки получены в аморфном состоянии, но каких-либо подтверждений этому (например, дифрактограмм) не приведено. Вывод о том, что «гидрид нельзя считать классическим химическим соединением» спорный и требует серьезной проверки.

5. Автор говорит о том, что при получении экстракционных кривых использовался порошок титана с размером частиц от 10 до 100 мкм; как известно из недавних исследований, на которые ссылается автор, на вид экстракционных кривых может значительным образом влиять распределение водорода внутри образца. Автор не указывает, являются ли исследуемые частицы достаточно мелкими, чтобы не учитывать этот эффект.
6. При введении в рассмотрение каждой из ловушечных моделей автор вводит зависимость индуцированных деформаций от водорода, утверждая, что эти деформации зависят только от концентрации диффузно подвижного водорода. Однако работа [176], на которую автор ссылается, экспериментально подтверждает этот факт только для незначительных градиентов концентрации водорода на поверхности. Остается неясным, может ли ловушечный водород индуцировать внутренние деформации, и насколько сильно эти внутренние деформации будут влиять на запирающий эффект.
7. Работа содержит ряд погрешностей грамматического и смыслового характера. Например: «два подгоночных параметра, размер которых равен некоторому объему» (стр. 21), «бесконечное тело с полубесконечной трещиной начального круглого отверстия» (стр. 116), «касательные напряжения» вместо «нормальных» в формуле (148) на стр. 99. Кроме того, граничные условия в уравнении (147) и (148) на стр. 99 не соответствуют правильной словесной формулировке задачи, а также правильной графической иллюстрации на рисунке 34 (стр.99).

Несмотря на ряд пропущенных слов, опечаток и погрешностей, в целом, работа написана хорошим научным языком.

Указанные замечания не умаляют значимости полученных результатов и не снижают общей положительной оценки работы, и скорее призваны помочь автору определить направление дальнейших исследований по теме диссертации. Диссертация Полины Михайловны Григорьевой является законченным научным исследованием и выполнена на профессиональном уровне. Полученные в ней новые и оригинальные результаты представляют большой практический и теоретический интерес и могут служить богатым методическим материалом для научных и инженерно-технических работников, а также в учебном процессе в ВУЗах.

Диссертационная работа Полины Михайловны Григорьевой «Влияние деформаций высокопрочных конструкционных материалов на транспорт водорода из внешней среды» отвечает требованиям п.9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24.09.2013 года (в редакции от 28.08.2017 года), а ее автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.8. - Механика деформируемого твердого тела.

Официальный оппонент

Кандидат физико-математических наук,

старший научный сотрудник

научно-исследовательского отдела № 2

Научно-исследовательского института прогрессивных технологий

ФГБОУ ВО «Тольяттинский государственный университет»

Мерсон Евгений Дмитриевич

445020, г. Тольятти, ул. Белорусская, д. 14,

Тел.: +7 (8482) 44-93-03, E-mail: E.Merson@tltsu.ru

1 декабря 2022 г.

