

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.075.01,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО  
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ  
МАШИНОВЕДЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК МИНИСТЕРСТВА  
ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ, ПО  
ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 29.12.2020 г, протокол № 20

О присуждении Кузькину Виталию Андреевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора физико-математических наук

Диссертация «Термомеханические процессы в твердых телах с микроструктурой» по специальности 01.02.04 – «Механика деформируемого твердого тела» принята к защите 24 сентября 2020 г., диссертационным советом Д 002.075.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем машиноведения Российской академии наук Министерства образования и науки Российской Федерации, 199178, Россия, Санкт-Петербург, В.О., Большой пр-т, д. 61. Совет работает согласно приказу Минобрнауки РФ № 45/нк от 20.01.2019.

Соискатель Кузькин Виталий Андреевич, 1986 года рождения, в 2011 году защитил диссертацию на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 – «Механика деформируемого твердого тела» на тему «Определение эквивалентных термомеханических параметров идеальных кристаллов» в диссертационном совете Д 002.075.01, созданном на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем машиноведения Российской академии наук. В настоящий момент работает старшим научным сотрудником лаборатории «Дискретные модели механики» Федерального

государственного бюджетного учреждения науки Института проблем машиноведения Российской академии наук.

Диссертация выполнена в лаборатории «Дискретные модели механики» Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем машиноведения Российской академии наук.

**Научный консультант:** Кривцов Антон-Иржи Мирославович, гражданин Российской Федерации, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, директор Высшей школы теоретической механики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого.

**Официальные оппоненты:**

Гендельман Олег Валерьевич, гражданин Российской Федерации, доктор физико-математических наук, профессор факультета инженерной механики, Израильского технологического института (Израиль). Дал положительный отзыв на диссертацию с замечаниями:

1. Не совсем понятно разделение между механической и тепловой энергией, например, в связи с цепочкой ФПУ (раздел 4.2.10). В дискретной модели энергия системы равна сумме кинетической энергии частиц и потенциальной энергии связей. В этом смысле любая энергия - механическая. Возможно, речь идет о разделении между энергиями, «запасенными» в длинноволновых коротковолновых модах системы, но этот вопрос требует дополнительного уточнения.

2. Для той же задачи, неясно влияние использованных граничных условий на результат.

3. В главе 4 не вполне ясны условия применимости адиабатического приближения.

Лурье Сергей Альбертович, гражданин Российской Федерации, доктор технических наук, главный научный сотрудник лаборатории неклассических моделей механики композиционных материалов, Федерального

государственного бюджетного учреждения науки Институт прикладной механики Российской академии наук. Дал положительный отзыв на диссертацию с замечаниями:

1. В главе 1, при рассмотрении задачи о равновесии конечной решетки с вакансиями, применяется в качестве основного аналитического аппарата для решения задачи дискретное преобразование Фурье, определяемое конечными суммами (1.12) по узлам решетки от преобразуемой функции. В результате решение определяется конечным набором значений в виде двойной конечной суммы (1.22) при некотором  $N$ . В дальнейшем автор переходит без обоснования к пределу по  $N \rightarrow \infty$  для бесконечной решетки и вольно записывает решение в виде двойного интеграла (1.23), на основе которого делает ряд важных заключений о свойствах задачи. Следует отметить, что переход от конечной суммы (1.22) к двойному интегралу (1.23) в работе не обоснован, и нет ссылок на работы, где содержалось бы это обоснование. Хотя сам по себе этот переход не является тривиальной или очевидной задачей.

По поводу дискретного преобразования Фурье, используемого в главах 2-4 отметим, что в работе при обращении используется интегральная форма обратного преобразования, по видимому, как некоторая предельная форма для бесконечной решетки. Объяснений нет. Как минимум следовало бы доказать (показать, если это очевидно авторам), что такое использование обратного преобразования дает оригинал.

2. На стр. 36. говорится, что коэффициент Пуассона увеличивается с пористостью. Однако все происходит с точностью до наоборот. Для сред с полями дефектов, а пористость является именно частным случае дефектов - дислокаций, когда свободная деформация определяется только шаровой частью тензора свободных - дислокаций, и эффективные модули упругости и коэффициент Пуассона убывают. Автор мог бы в этом легко убедиться также, используя известные соотношения упругости, связывающие модуль упругости

с модулем сдвига, учитывая, что для пористых сред модуль сдвига не меняется.

3. Не останавливаясь на существующих неточностях (скорее всего неприципиальные), отметим главное замечание по главе 1. В тексте главы 1 нельзя согласиться с выводами главы 1. О том, что «концентрация деформаций вблизи вакансий не может быть описана в рамках классической теории упругости». Выводы автора являются, вероятно, поспешными. Сравнительный анализ полученного решения с известными исследованиями других авторов скорее должен был привести к выводу о том, что недостаточная точность результатов связана с упрощениями, вызванными учетом только парных взаимодействий без анализа влияния дальних взаимодействий, угловых взаимодействий и пр.

Приведем и иные соображения. Легко установить соответствие между моделью среды с полем дефектов и градиентной моделью среды, учитывающей масштабные эффекты через уравнение  $utt=c^2(u_{xx}-\lambda^2 u_{xxxx})$ . Вот, существует достаточно много известных исследований: Hao&Maris (PRL200, PRB2001)&Daly, et al.(PRB 2004), Marangaty&Sharma(PRL&JMPS, 2007), Jakata&Every (PRB,2008), based on exp. Data of Nilsson&Nelin (PRB1972), Dolling&Waugh (in Lattice Dynamics, ed. By Wallis, 1965), основанных на аккуратном моделировании (в том числе дискретном с анализе дисперсионных соотношений) по оценке масштабного параметра в континуальной модели, т.е. по оценке роли масштаба в различных изотропных средах, которые показали, что для изотропных сред масштабный параметр является чрезвычайно малым даже для материалов с длинными связями типа гелей  $\lambda \approx 0,5-2A$ .

Следовательно, и поправки к классической теории для изотропных тел являются ничтожными (иная ситуация имеет место для неоднородных тел). Это объясняет почему неудачными являлись попытки уточнить напряженной напряженно-деформированное состояние в окрестности концентраторов

напряжений, предпринимаемые достаточно давно с 60-х годов. Отметим, что первая глава стоит в стороне от общей канвы диссертационной работы и я искренне считаю, что и без этой главы работа соответствовала бы требованиям к диссертации на соискание ученой степени доктора наук по объему рассмотренных научных проблем.

4. Рассматривая далее работу, начиная со второй главы можно отметить, что многие соотношения, заключения и выводы даются без полных преобразований и доказательств. Таких примеров в работе много. Например, в качестве комментария к формуле (2.58) автор пишет «подынтегральное выражение в формуле (2.58) меняет знак и осциллирует с частотой пропорциональной времени. Следовательно, второе слагаемое в (2.58) стремится к нулю». Далее дается ссылка на то, что можно доказательство сделать с «использованием асимптотических методов». И первое и второе высказывание далеко не очевидны, и требует доказательства. Этого нет в диссертации. Аналогично, на стр. 82, пишется по поводу представлений (2.124), (2.125): «... на основании общих результатов, полученных а [47] можно предположить, что величина .....стремится к нулю ... ». Доказательств не приводится, а ссылка на асимптотические методы только усиливает неопределенность данного высказывания.

Приведем ряд незначительных замечаний. Дисперсионные соотношения во многих случаях построены в пространстве преобразований Фурье, какой смысл и какую ценность они представляют?

На стр. 97 без пояснений утверждается, что при моделировании поперечных колебаний решетки графена (почему графена, а не просто решетки) поперечные колебания и колебания в плоскости можно рассматривать независимо, что мол нет связанности. В действительности — это далеко не так, предположение является достаточно сильным. Имеются континуальные адгезионные модели деформирования сверхтонких плоских систем, указывающие на наличие связанности даже в случае линейной задачи.

По поводу моделирования систем цепочек даже в рамках скалярных цепочек возникает вопрос зависимости решения от выбора подсистем цепочек (рис. 2.11), так как даже на примере (рис. 2.11) выбор подсистем цепочек не является единственным. Действительно ли это так? Как тогда трактовать эту неединственность и модель в целом?

Много погрешностей в тексте, некоторые из них, связаны с тем что в тексте имеются ссылки на формулы, которые используются в дальнейшем тексте и не обсуждались в тексте предыдущем: стр. 163 - ссылка на (3.115) при том, что текущие ссылки имеют номер (3.104); также см. стр. 163 (ссылка на формулу (3.197), см. также стр. 187 и др.

Наряду с тем, что многие из соотношений, приводимые в тексте даются без последовательного вывода и обсуждения, разрывы в логике изложения, связанные с нумерацией, еще больше затрудняет ознакомление с работой.

5. Принятую в диссертации терминологию и форму представления материала можно назвать весьма оригинальной. Само по себе это затрудняет чтение, кроме того имеются нечеткости и некорректности при изложении материала. Например, на стр. 45 фактически в самом начале главы 2 приводится фраза «...сила, действующая на каждую частицу, представляется в виде линейной комбинации перемещений всех частиц:». Далее здесь же скалярная скорость задается как скалярная функция от вектора, что не вполне корректно. Здесь же с минимальными объяснениями говорится о возможности описания уравнений движения растянутой цепочки с парными взаимодействиями соседей и пишется, что  $C$  есть жесткость угловой пружинки (без объяснений).

В первой части главы 2, где излагаются основные определения и основы технологии построения решения нет желаемой четкости. Решение ищется в форме гармонических колебаний и используется дискретное преобразование Фурье. При получении решения во вполне очевидной форме через сдвиг фаз « $u$ » гармонических колебаний в отношении координаты « $x$ » без должного

обсуждения и четкой физической трактовки вводится осреднение соответствующее статистическому определению математического ожидания. Фактически, осреднение производится по характеристике сдвига фаз  $u$ . Почему? Потому, что именно с этой характеристикой связаны начальные скорости, а они являются случайными характеристиками? Возможна ли другая трактовка?

Утверждение, касающееся равенства (2.36) остается недоказанным, также, как и утверждение касающееся (2.39) - «выполняется почти для всех  $k$  ( $k$  - волновое число)».

б. Ряд замечаний по главе 2 приводятся ниже. Важные определения, которые затем повторяются везде в работе даются на стр. 57, но снова чрезвычайно скупо, без необходимого объяснения, тем более, что используется нетривиальная техника и нетривиальная математика.

Отметим, что в диссертации почти повсеместно не приводится ссылок на соответствующую математическую фундаментальную литературу, а даются ссылки на статьи самого автора и научного консультанта. От этого может страдать достоверность.

Например, остается принять на веру, почему начальные условия для ковариаций записываются в виде (2.54), чем это определяется. Если эти условия постулируются, то спрашивается могут ли быть сформулированы иные начальные условия и к чему они могут привести. Далее эти же условия рассматриваются в различных разделах работы без пояснения и трактовки.

Не вполне понятно, как получается третье из условий (2.57) записанное в трансформантах Фурье? Конечно, можно догадаться, но следовало бы привести четкий вывод.

Решение (2. 58) ввиду его важности для дальнейшего следовало бы получить аккуратно, чтобы можно было видеть, что является параметром обратного преобразования Фурье в (2.58) (скрыто в  $\omega$ ) как преобразовались фундаментальные решения уравнения (2.56) после

подстановки в начальные условия, записанные в трансформантах?

Тоже самое по поводу важного соотношения (2.60). Имеет место фраза «Подставляя параметры (2.3) ...». Неясно какие параметры (2.3) следует подставлять в (2.57) чтобы получить это равенство. Ведь (2.3) не параметры, а уравнение движения.

На стр. 84 автор пишет, что вводится Гамильтониан, но Гамильтониан должен быть записан по определению через импульсы и поэтому он строится с помощью динамического Лагранжиана и с использованием преобразования потенциальность. Мне не удалось этого увидеть.

7. Имеются вопросы (наверное, принципиальные), касающиеся результатов, приведенных на стр 60. Первое, они даются почти без пояснений и чрезвычайно скупо с точки зрения доказательств и выводов.

Без обсуждений дается решение (без полного и вывода, а это надо делать в диссертации), показывающее, что имеет место монотонное затухание температуры, определенной с использованием осреднения по статистике. Этот момент никак не обсуждается, есть только одна фраза «кинетическая энергия совершает высокочастотные колебания, связанные с переходом части энергии в потенциальную». Такого пояснения точно недостаточно.

Надо отметить, что исходная задача (все задачи в диссертации таковы) рассматривается как консервативная, т.е. рассматривается полностью обратимый процесс. Например, для обратимого процесса колебания осциллятора переход кинетической энергии с в потенциальную происходит без изменения амплитуды. В работе рассматривается скалярная модель решетки, в рамках линейного процесса, более того в тексте работы встречается предположение о том, что гармоники не взаимодействуют.

Так в чем причина диссипации? К сожалению, автор не дает и сравнений с результатами других авторов, хотя ссылки на подобные работы имеются. Напомню, что, например, в работе Phys. Rev. E 81, 020103 (2010) для моделирования волновых свойств температуры и верификации уравнения

теплопроводности Максвелла-Каттанео с использованием дискретного молекулярного моделирования для цепочки с линейными взаимодействиями, но в уравнение движения дополнительно введены слагаемые пропорциональные скорости, т.е. введено внутреннее трение и характеристика шума, т.е. косвенно-нелинейность. В статье *Wave-Relaxation Duality of Heat Propagation in Fermi-Pasta-Ulam Chains* // *Modern Physics Letters B*. 2012. V. 26. No. 32. 1299001 для моделирования диссипативного и волнового процесс изменения температур с привлечением обобщенного уравнения Максвелла-Каттанео также используются уравнения Ланжевеновской динамики, содержащие характеристики внутреннего трения (через скорости) и шума, в предположении нелинейного взаимодействия частиц через потенциалы Ферми-Паста-Улама. Кстати, в последней работе, на основе уточненного моделирования наиболее полного в настоящее время, насколько мне известно, устанавливается, что термометрическая проводимость  $\chi$  (теплопроводность) возрастает с увеличением длины волны по степенному закону с показателем 0.363, что визуально выглядит как почти линейная зависимость от длины фрагмента. Эти моменты частично обсуждаются в последних разделах диссертационной работы, но, по-моему, без ссылок на конкретные исследования других авторов.

Данные в диссертации результаты выходят за рамки указанных исследований, согласованных с законами сохранения. В работе явления диссипации температурных полей, связанные напрямую с законами сохранения, не объясняются и это вызывает удивление.

Таким образом, главное замечание связано с не вполне корректным или неполным описанием необратимых процессов. Недостаточно объяснений. Эта часть работы является принципиальной - она так или иначе повторяется в диссертации в других разделах и представляет особую ценность данного исследования. К сожалению, эта часть проведенных исследований, столь скупо обосновывается, что их приходится принимать на веру.

За счет чего вносится мнимая диссипация? за счет континуализации? за счет ряда предположений, сводящихся к добавлению или отбрасыванию некоторых слагаемых при выводе уравнений движения и их факторизации? за счет использования разложений и связанных с ним дополнительных предположений? Неизвестно.

9. Весьма интересной и логичной выглядит часть, где автор пытается указать на соответствие между континуальной термоупругостью и дискретным описанием. Эта часть достаточно логична, но опять же непоследовательна. Так, уравнение первого закона термодинамики (второе уравнение (4.27)) записано не в классическом виде, а фактически с учетом уравнения баланса тепла, что в дальнейшем и дает правильный и ожидаемый результат.

Не обсуждается второй закон термодинамики, хотя речь идет о диссипативных процессах. Далее, когда в главе 4 обсуждается нелинейный потенциал Ферми-Паста-Улама, и впервые автор оказывается на пути логического объяснения диссипации за счет учета нелинейности. Но, к сожалению, доказательства, как и почти везде, опущены автором. Они заменены фразой «Подставляя начальное распределение температуры .... о вторую их формул (4.46) получим». Возможно, специфическая математика и логика построений и очевидна для автора, но она не вполне очевидна для неподготовленного к ней читателя.

Шилько Евгений Викторович, доктор физико-математических наук, заместитель директора по научной работе, заведующий лабораторией компьютерного конструирования материалов, Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук. Дал положительный отзыв на диссертацию с замечаниями:

1. Во вводных частях основных разделов диссертации проводится

обзор исследований различных авторов, посвященных изучаемым аспектам поведения кристаллических материалов и структур. В то же время совершенно не упомянутым остался широкий пласт работ по механике решеток / сетей пружин (lattice models / spring network models). В рамках этих моделей также развито аналитическое описание и осуществляется сопоставление и переход к континууму. Хотя эти модели, как правило, применяются для описания материала на «надатомном» масштабе и для определения параметров потенциалов межчастичного взаимодействия в методах типа укрупненной молекулярной динамики, их формализм также позволяет аналитически рассматривать кристаллы и поэтому заслуживает отдельного упоминания.

2. В работе описание взаимодействия атомов/частиц ограничено парным приближением, что обосновывается приближением линейного отклика решетки и возможностью использования в этом случае линейно-разностных операторов. В то же время потенциалы взаимодействия атомов в реальных кристаллах являются многочастичными, что традиционно формулируются в терминах зависимости потенциала от локальной плотности, либо от угла между связями атома со смежными соседями. В обоих случаях также применимо линейное приближение к описанию этих вкладов в силы взаимодействия при малых относительных смещениях атомов. Учет этих (также линейных) вкладов способен существенно изменить динамику как быстрых, так и медленных процессов в кристалле.

3. В работе различными способами получен целый ряд вариантов соотношений, описывающих волновое распространение кинетической энергии в кристаллах, в том числе осуществлены предельные (континуальные) переходы. Эти соотношения свидетельствуют о баллистическом механизме распространения тепла в монокристаллах. В то же время не обсуждается фундаментальный вопрос о том, почему в традиционных 3D материалах данный механизм сменяется диффузионным. Является ли баллистический способ переноса особенностью низкоразмерных материалов/структур, либо

нарушение «баллистичности» теплопереноса является результатом рассеяния энергии на точечных, линейных и плоских дефектах реальных дефектных (и поликристаллических) материалов?

4. Не до конца понятным оппоненту является фундаментальный вопрос о разделении автором кинетической энергии на энергию направленного движения атомов и энергию неупорядоченного движения (собственно, тепловую энергию). Это актуально, в частности, для понимания, баллистический перенос какой составляющей рассматривается в Главе 3 диссертации. Хотя ковариационный подход и используемые начальные условия, очевидно, должны определять анализ именно тепловой составляющей, данный вопрос требует дополнительного прояснения. При этом возникает отдельный вопрос о распространении собственно упругих волн в линейно-упругом кристалле наряду с тепловыми волнами (или их идентичности).

5. В большинстве разделов диссертации основное внимание уделяется описанию математических моделей и выводу общих аналитических соотношений, однако анализ конкретных результатов/последствий, к которым приводят или могут приводить эти соотношения, приводятся в этих разделах реферативно и незаслуженно лаконично. В тоже время сами по себе эти результаты и их следствия представляют отдельный интерес и заслуживают серьезного обсуждения и сопоставления с данными экспериментальных исследований и атомистического моделирования.

6. В названии диссертации делается акцент на микроструктуру материала, в то время как основная часть результатов посвящена бездефектным кристаллам (одно- и многокомпонентным), либо кристаллам, содержащим некоторое число точечных дефектов только одного типа (вакансий). Кроме того, термин «тела» традиционно подразумевает трехмерные объекты, в то время как большая часть работы посвящена низкоразмерным материалам.

7. В тексте диссертации местами встречаются описки, неточности в формулировках, ошибочные номера формул или указания на формулы, которые выводятся позднее, используются переменные, определения которых не приведены или приведены позже, на отдельных графиках приведены неправильные обозначения осей.

**Ведущая организация** – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича Сибирского отделения Российской академии наук, в своём отзыве, подписанном научным руководителем, заведующим лабораторией «Физика быстропротекающих процессов», доктором физико-математических наук, профессором, академиком РАН, Фоминым Василием Михайловичем и утвержденным директором, доктором физико-математических наук, член-корреспондентом РАН, Шиплюком Александром Николаевичем дала положительную оценку диссертации с замечаниями:

1. Прежде всего, название работы «Термомеханические процессы в твердых телах с микроструктурой» несколько расплывчато и не несет никакой детализирующей информации. Предметом всей механики деформируемого твердого тела являются всевозможные термомеханические процессы в твердых телах. Кроме того, и все твердые тела обладают микроструктурой. По этим причинам название не передает информацию о содержании диссертации.

2. В разделе диссертации «Цели и задачи» (стр.8) перечисляются задачи, в том числе: «Разработка подходов к описанию процессов термоупругого деформирования и волнового процесса переноса энергии в кристаллических твердых телах на микро- и наноуровне». В то же время, в разделе «Методы исследования» (стр.9) говорится, что «Основным методом исследования, используемым в данной работе ... является метод динамики частиц». Но на микро- и наноуровне «частицами» являются атомы. Такое использование терминов («частица» или атом) очень затрудняет чтение текста. Например, на стр. 97 в разделе 2.3.7.2 рассматриваются «...поперечные

колебания растянутого графенового листа». Перед формулой (2.161) находится предложение «Элементарные ячейки, содержащие по две частицы...». Но графен — это двумерная аллотропная модификация углерода, образованная слоем атомов углерода толщиной в один атом. Что же тогда подразумевал автор на стр. 97 (частицу или атом)?

3. На стр. 7 правильно подчеркивается, что кинетическая температура пропорциональна энергии хаотического теплового движения атомов. Однако, для того чтобы рассчитать эти величины, необходимо разбить полную систему атомов на атомные подсистемы и найти координаты и упорядоченные скорости их центров масс. В результате такой операции, после численного решения системы уравнений Гамильтона, мы опишем полную динамику термомеханических процессов в твердых телах микро- или наноструктурного размера. Однако в работе такая процедура ни разу не проводилась.

4. В качестве примера используем вывод уравнения равновесия, проведенный для модельной решетки с вакансиями (стр.21). После описания базисных векторов (1.1) делается утверждение, что «Во введенном базисе любой двумерный вектор представляется в виде...». Далее для этого произвольного вектора вводятся разностные операторы (1.4) и выписываются «уравнения равновесия частицы  $n$ ,  $m$ , имеющей  $b$  ближайших соседей» (ур. (1.5)). После проецирования этого уравнения на базисные векторы автор получает уравнения (1.6), которые описывают равновесия частиц. Недостаток изложения состоит в том, что для произвольного вектора, который никакого отношения не имел к частицам, получились уравнения равновесия этих частиц. Возникает физическая неувязка.

5. Особо следует отметить использование автором работы словосочетания точное аналитическое решение на протяжении всей работы (например, «Получено точное аналитическое решение задачи о деформировании двумерной треугольной кристаллической решетки...»).

Однако, еще в 1892—1899 годах Анри Пуанкаре доказал, что существует бесконечно много частных решений для задачи, содержащий от трёх и более тел. Следовательно, в общем случае отсутствует точное аналитическое решение для системы с числом частиц больше двух. Конечно, если мы накладываем специальные связи, то, как показал автор, можно найти аналитическое решение и для систем с гораздо большим числом частиц, но не атомов, на которые мы не можем наложить какие-либо связи. По этой причине лучше отказаться от такого словосочетания в работе, где планируется рассмотрение твердых тел на микро- и наноуровне.

Отзыв рассмотрен и одобрен на заседании семинара ИТПИМ СО РАН.

Соискатель имеет 39 научных работ, в том числе 17 научных работ по теме диссертации, из них в рецензируемых научных изданиях, входящих в международные базы цитирования Web of Science и Scopus опубликовано 17 работ, в том числе 5 в журналах Q1 и 4 в журналах Q2.

**Наиболее значимые работы по теме диссертации:**

1. Kuzkin, V.A. Comment on negative thermal expansion in single-component systems with isotropic interactions // *Journal of Physical Chemistry*. 2014. – Vol. 118, No. 41. – pp. 9793-9794.
2. Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M., Jones, R.E., Zimmerman, J.A. Material stress representation of equivalent stress tensor for discrete solids // *Physical Mesomechanics*. – 2015. – Vol. 18, No. 1. – p. 13.
3. Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Nonlinear positive/negative thermal expansion and equations of state of a chain with longitudinal and transverse vibrations // *Physica Statatus Solidi b*. – 2015. – Vol. 252. –p. 1664.
4. Kuzkin, V.A., Kachanov, M. Contact of rough surfaces: Conductance-stiffness connection for contacting transversely isotropic half-spaces // *International Journal of Engineering Science*. – 2015. – Vol. 97. – pp. 1-5.
5. Kuzkin, V.A. On angular momentum balance in particle systems with

periodic boundary conditions // *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*. – 2015. – Vol. 95, Is. 11. – pp. 1290-1295.

6. Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M., Podolskaya, E.A., Kachanov, M.L. Lattice with vacancies: elastic fields and effective properties in frameworks of discrete and continuum models // *Philosophical Magazine*. – 2016. – Vol. 96, No. 15. – pp. 1538-1555.

7. Кузькин, В.А., Кривцов, А.М. Высокочастотные тепловые процессы в гармонических кристаллах // *Доклады академии наук*. – 2017. – Т. 472, No. 5. – с. 529-533.

8. Кузькин, В.А., Кривцов, А.М. Аналитическое описание переходных тепловых процессов в гармонических кристаллах // *Физика твердого тела*. – 2017. – Т. 59, Вып. 5. – с. 1023-1035.

9. Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Fast and slow thermal processes in harmonic scalar lattices // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2017. – Vol. 29. – p. 505401.

10. Tsaplin, V.A., Kuzkin, V.A., An asymptotic formula for displacement field in triangular lattice with vacancy // *Letters on materials*. – 2017. – Vol. 7, No. 4. – pp. 341-344.

11. Saadatmand, D., Xiong, D., Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M., Savin, A.V., Dmitriev, S.V., Discrete breathers assist energy transfer to ac driven nonlinear chains // *Physical Review E*. – 2019. – Vol. 97. – p. 022217.

12. Tsaplin, V.A., Kuzkin, V.A., Temperature oscillations in harmonic triangular lattice with random initial velocities // *Letters on materials*. – 2018. – Vol. 8, No. 1. – pp. 16-20.

13. Krivtsov, A.M., Kuzkin, V.A. Discrete and continuum thermomechanics. In: Altenbach H., Öchsner A. (eds) *Encyclopedia of Continuum Mechanics*. Springer, Berlin, Heidelberg (2018).

14. Kuzkin, V.A. Thermal equilibration in infinite harmonic crystals // *Continuum Mechanics and Thermodynamics*. – 2019. – Vol. 31, No. 5. – pp. 1401-

1423.

15. Kuzkin, V.A. Unsteady ballistic heat transport in harmonic crystals with polyatomic unit cell // Continuum Mechanics and Thermodynamics. – 2019. – Vol. 31, No. 6. – pp. 1573-1599.

16. Berinskii, I.E., Kuzkin, V.A. Equilibration of energies in a two-dimensional harmonic graphene lattice // Philosophical Transactions of the Royal Society A. – 2019. – Vol. 378, Is. 2162.

17. Kuzkin, V.A., Krivtsov, A.M. Ballistic resonance and thermalization in Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou chain at finite temperature // Physical Review E. – 2020. – Vol. 101, p. 42209.

Материалы диссертации рассматривались на 15 международных и всероссийских конференциях.

**На автореферат поступило 9 отзывов, все положительные.**

1. Отзыв старшего научного сотрудника Лаборатории физико-химических свойств полупроводников Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, доктора физико-математических наук Анкудинова Александра Витальевича (без замечаний).
2. Отзыв ведущего научного сотрудника Института проблем сверхпластичности металлов РАН, доктора физико-математических наук, профессора РАН Баимовой Юлии Айдаровны с замечаниями:
  - В параграфе 1.6 рассчитаны упругие модули решетки с вакансиями и сравниваются результаты, полученные молекулярной динамикой и с помощью аналитического расчета. Автор пишет, что определяется эффективная форма данных отверстий, однако упоминается только круглая форма. Исследовались ли другие формы и какими они характеризовались факторами формы?
  - Хотелось бы видеть в автореферате, хотя бы кратко представленные, итоговые выводы по полученным результатам.

3. Отзыв профессора кафедры машиностроения Санкт-Петербургского горного университета, доктора технических наук Габова Виктора Васильевича (без замечаний).
4. Отзыв директора Института прикладной математики Дальневосточного отделения РАН, доктора физико-математических наук, академика РАН Гузева Михаила Александровича (без замечаний).
5. Отзыв заведующего лабораторией механики разрушения материалов и конструкций Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения РАН, доктора физико-математических наук Коробейникова Сергея Николаевича с замечаниями:
  - Из текста автореферата неясно, как уравнения поперечного колебания графена (14), (25), в которых участвует только один параметр жесткости  $s$ , учитывают сложную структуру многочастичных взаимодействий атомов углерода в графене.
6. Отзыв директора Института проблем сверхпластичности металлов РАН, доктора физико-математических наук, член-корреспондента РАН Мулюкова Радика Рафиковича (без замечаний).
7. Отзыв ведущего научного сотрудника лаборатории физики и механики полимеров Федерального исследовательского центра химической физики им. Н.Н. Семенова РАН, доктора физико-математических наук Савина Александра Васильевича (без замечаний).
8. Отзыв старшего преподавателя кафедры машиностроения Оклендского университета, доктора физико-математических наук Сорокина Владислава Сергеевича (без замечаний).
9. Отзыв заведующего отделом многомасштабного суперкомпьютерного моделирования Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур РАН,

доктора физико-математических наук Стегайлова Владимира Владимировича с замечанием:

- В тексте автореферата никак не обсуждается сравнение результатов работы с экспериментальными данными.

**Выбор официальных оппонентов и ведущей организации** обосновывается тем, что они представляют собой признанных компетентных действующих специалистов в области механики деформируемого твёрдого тела, имеющих научные публикации в областях науки, затрагиваемых диссертацией, способных определить научную и практическую ценность диссертационной работы.

**По результатам защиты диссертационный совет отмечает, что основные научные результаты, полученные соискателем, заключаются в следующем:**

1. **Предложен новый** подход, основанный на дискретном представлении деформируемого твердого тела, позволяющий в линейном приближении аналитически описывать влияние точечных дефектов на упругие и прочностные свойства кристаллических решеток. На основании данного подхода **впервые** получено точное аналитическое решение задачи о деформировании двумерной треугольной кристаллической решетки с двояко-периодической системой дефектов. Показано, что концентрация деформаций вблизи дефекта существенно отличается от результатов, получающихся при использовании локальной линейной теории упругости.
2. **В результате развития подхода** к описанию нестационарных переходных процессов **впервые** получено аналитическое выражение, позволяющее оценить характерные времена и частоты колебательной релаксации, связанной с уравниванием кинетической и потенциальной энергий и перераспределением кинетической энергии по степеням свободы элементарной ячейки. **Впервые** получена формула, связывающая

стационарные значения кинетических энергий, соответствующих степеням свободы элементарной ячейки, с начальными условиями. На примере двухатомной цепочки, двумерной треугольной решетки и решетки графена показано, что полученные формулы согласуются с результатами численного решения уравнений динамики.

3. **Развит** подход к континуальному описанию переноса энергии в кристаллических твердых телах с произвольной сложной решеткой в линейном приближении. **Впервые** получена формула, описывающая изменение во времени начального поля кинетической энергии в бесконечном кристалле со сложной решеткой. Аналитически и численно решен ряд задач о переносе энергии в двухатомной цепочке, квадратной решетке и решетке графена. Показано, в частности, что в процессе переноса кинетические энергии подрешеток двухатомной цепочки отличаются. В решетке графена перенос энергии существенно анизотропен.
4. **Развит** подход к описанию термоупругого поведения кристаллических твердых тел с баллистическим переносом тепловой энергии. Аналитически и численно решена задача термоупругости для цепочки Ферми-Паста-Улама с начальным периодическим распределением температуры. Показано, что в данной задаче возникает **новое** резонансное явление, вызванное совпадением частот колебаний температурного поля с собственными частотами механических колебаний системы. В результате численного моделирования **впервые** показано, что механические колебания затухают монотонно, а эффект возвращения, характерный для данной системы при отсутствии теплового движения, при конечной температуре не наблюдается.
5. **Развит** подход к получению нелинейных определяющих соотношений, связывающих в адиабатическом приближении напряжения, объем и тепловую энергию при термоупругом деформировании кристаллов. Получены **новые** нелинейные по тепловой энергии определяющие

соотношения для цепочки, совершающей продольные и поперечные колебания. Показано, что нелинейность зависимости теплового давления от тепловой энергии особенно существенна при малых деформациях цепочки.

**Теоретическая значимость** исследования обоснована тем, что в диссертации разработан новый аналитический подход к описанию термомеханических процессов в кристаллических твердых телах, содержащих малое число дефектов. На основе фундаментальных законов механики предложены модели упругого и термоупругого деформирования, переходных процессов и переноса энергии в кристаллических твердых телах. Получены точные аналитические формулы для полей перемещений в треугольной решетке с точечными дефектами. Впервые получено точное аналитическое решение, описывающее выравнивание кинетической и потенциальной энергии и перераспределение кинетической энергии по степеням свободы в гармонических кристаллах сложной структуры. Получена формула, описывающая перенос кинетической энергии в таких кристаллах в континуальном приближении. Впервые аналитически решена задача термоупругости для цепочки Ферми-Паста-Улама с синусоидальным распределением начальной температуры. Показано, что в данной задаче возникает механический резонанс, вызванный совпадением частоты колебаний температуры с первой собственной частотой цепочки. В рамках разработанного подхода решен ряд задач, имеющих самостоятельный интерес и демонстрирующих особенности данного подхода по сравнению с классическими теориями термоупругости и теплопроводности.

Разработанный подход обеспечивает общие теоретические основы для описания термоупругого деформирования кристаллических материалов на микро- и наноуровне.

**Значение полученных соискателем результатов исследования для практики** продемонстрировано применением разработанных моделей и методик для решения ряда конкретных задач. Предложенные подходы

позволяют решать задачи термоупругости материалов и конструкций на наноуровне (например, в микроэлектромеханических системах), описывать поведение кристаллических материалов в сильно неравновесных условиях (в т.ч. при лазерном воздействии), моделировать перенос энергии в кристаллических твердых телах и метаматериалах.

**Оценка достоверности** полученных результатов выявила, что полученные в работе аналитические и численные решения находятся в хорошем соответствии с теоретическими результатами, имеющимися в литературе и согласуются с известными экспериментальными данными. Для обеспечения достоверности многие задачи решались в работе несколькими независимыми аналитическими и численными методами. Достоверность результатов обусловлена также математически выверенными, физически корректными, непротиворечивыми построениями.

**Личный вклад:** соискателем предложен новый подход к описанию термомеханических процессов в твердых телах с кристаллической структурой, сформулированы гипотезы и математическая постановка задачи, выбраны методы исследования, на основе которых самостоятельно получены все основные результаты работы.

Диссертационная работа Кузькина Виталия Андреевича является законченной научно-квалификационной работой, выполненной на высоком научном уровне. В работе разработаны теоретические положения, совокупности которых можно квалифицировать как существенное научное достижение в области термомеханики материалов с кристаллической структурой. Решенные в диссертации задачи имеют важное значение для развития механики деформируемого твердого тела. По своему содержанию диссертация отвечает паспорту специальности 01.02.04 – «Механика деформируемого твердого тела». Работа полностью соответствует требованиям, установленным «Положением о порядке присуждения ученых

степеней», утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842 (ред. от 01.10.2018), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук.

На заседании 29 декабря 2020 года диссертационный совет принял решение (протокол № 20) присудить Кузькину Виталию Андреевичу учёную степень доктора физико-математических наук по специальностям 01.02.04 – «Механика деформируемого твердого тела».

При проведении открытого голосования диссертационный совет в количестве 8 человек, присутствовавших очно и 10 присутствовавших в режиме телеконференции, из них 6 докторов наук по научной специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 23 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за присуждение ученой степени - 18, против присуждения ученой степени - 0.

Председатель

диссертационного совета Д 002.075.01,

доктор физико-математических наук,

чл.- корр. РАН, профессор



 Д.А. Индейцев

Ученый секретарь

диссертационного совета Д 002.075.01,

доктор технических наук, профессор

 В.В. Дубаренко

29 декабря 2020 г.