

В диссертационный совет Д 002.240.01
при ФГБУН Институте проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН
119526, Москва, пр. Вернадского, 101, к. 1

ОТЗЫВ

официального оппонента
Белова Александра Юрьевича
на диссертацию **Волкова Михаила Андреевича** на тему
«Механические свойства анизотропных кристаллов и нанотрубок с отрицательным коэффициентом Пуассона некоторых кристаллических систем»,
представленную на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук по специальности
01.02.04 – Механика деформируемого твердого тела

Актуальность темы диссертации

Успехи в синтезе различных наноразмерных структур – нанотрубок, квантовых нитей, точек и ям – в последние годы существенно расширили круг актуальных проблем механики деформируемого твердого тела. Хотя для детального описания механических свойств нанобъектов, в первую очередь, прочности требуется знание сил межатомного взаимодействия, ряд важнейших особенностей их механического поведения может быть проанализирован в рамках линейной анизотропной теории упругости. Учет упругой анизотропии снимает ряд ограничений, накладываемых на свойства упруго-изотропных материалов требованием положительной определенности свободной энергии, и, кроме того, приводит к появлению принципиально новых связанных мод деформации, присущих исключительно анизотропным материалам. Одним из важных эффектов, обусловленных упругой анизотропией, является снятие ограничений на размер области отрицательных значений коэффициента Пуассона. Материалы и структуры с отрицательным коэффициентом Пуассона (они получили название ауксетиков) обладают уникальными механическими свойствами и значительным прикладным потенциалом. Несмотря на успехи, достигнутые в последнее время в поиске новых ауксетиков среди высокосимметричных кристаллов, в частности, кубических, ауксетические свойства низкосимметричных кристаллических материалов, обладающих большим количеством независимых упругих констант, оставались практически неизученными. Поэтому выбор М.А. Волковым в качестве объекта исследования ауксетических свойств кристаллов низкосимметричных систем (триклинной, моноклинной, тригональной, ромбической, тетрагональной) является **актуальным и практически**

важным. Практическая важность работы связана ещё и с тем, что уникальное сочетание механических и электронных свойств рассмотренных в ней нанотрубок с цилиндрической анизотропией открывает возможность их использования в качестве активных элементов различных электромеханических систем.

Структура диссертации

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка цитируемой литературы из 106 наименований, трех приложений, а также содержит 36 таблиц и 17 иллюстраций. Общий объем диссертации составляет 165 страниц, из которых 55 страниц занимают 18 таблиц Приложения 2, в которых приведены наиболее значимые результаты численных расчетов различных упругих свойств кристаллов и нанотрубок. В конце каждой главы имеется раздел выводы. По объему и структуре работа соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Апробация работы и публикации

Диссертационная работа М.А. Волкова прошла необходимую апробацию. По ее результатам опубликовано 7 печатных работ, в том числе 5 статей в журналах, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science, а также сделано 4 доклада на всероссийских и международных конференциях.

Общая характеристика работы

Диссертация характеризуется краткостью и ясностью изложения, имеет продуманную структуру. Во **введении** дается традиционное в таких случаях краткое обоснование цели и структуры диссертации, объектов исследования и обсуждаются возможные приложения материалов с ауксетическими свойствами. В нём также отмечаются новизна, практическая значимость, апробация работы и указывается личный вклад автора. Кроме того, вводная часть содержит обзор методов синтеза нанотрубок и результатов атомного моделирования их свойств. Также кратко излагаются основные результаты каждой из трех глав диссертации. Традиционная формулировка выносимых на защиту положений во введении отсутствует, однако имеется в автореферате.

В **первой главе** на основе обобщенного закона Гука для прямолинейно-анизотропной среды обсуждаются ориентационные зависимости модуля Юнга и коэффициента Пуассона как для общего случая (для триклинных кристаллов), так и при наличие элементов симметрии, имеющих у кристаллов моноклинной, тригональной, тетрагональной и

ромбической систем. Получены условия экстремума коэффициента Пуассона при растяжении вдоль симметричных направлений. Далее в первой главе анализируется радиальное распределение поперечных деформаций в длинной хиральной цилиндрически-анизотропной трубке при ее растяжении осевой силой. Особенностью этой задачи является существование обусловленных хиральностью связанных мод деформации, а именно неоднородной деформации растяжения-кручения. Для таких трубок автором получены аналитические выражения для локального модуля Юнга и двух локальных коэффициентов Пуассона: «радиального» и «окружного». Также определены зависимости данных локальных характеристик трубок с цилиндрической анизотропией от упругих постоянных, угла хиральности и отношения внешнего радиуса трубки к внутреннему.

Во **второй главе** приведены результаты анализа зависимости модуля Юнга и коэффициента Пуассона от направления в низкосимметричных кристаллах. При численных расчетах использовались экспериментальные значения упругих податливостей из справочника Ландолта-Бернштейна для кристаллов тригональной ($3, \bar{3}$), тетрагональной ($422, 4mm, \bar{4}2m, 4/mmm$), ромбической ($222, mm2, mmm$), моноклинной ($2, m, 2/m$) и триклинной ($1, \bar{1}$) систем (в скобках указаны классы симметрии). Определены глобальные экстремумы коэффициента Пуассона и модуля Юнга. Показано, что примерно у трети проанализированных (более 300) кристаллов существуют направления, для которых коэффициент Пуассона принимает отрицательные значения. Также установлено, что многие кристаллы с наибольшим отношением максимального значения модуля Юнга к минимальному являются ауксетиками. В заключение, проведено исследование экстремальных свойств коэффициента Пуассона, включая сравнение глобальных экстремумов с экстремумами при частных ориентациях, связанных с элементами симметрии.

В **третьей главе** на основе полученных в первой главе аналитических выражений исследуется поведение локальных значений модуля Юнга и двух коэффициентов Пуассона («радиального» и «окружного») в цилиндрически-анизотропных хиральных трубках. Численный анализ выполнен для трубок, полученных методом сворачивания пластин из кристаллов тригональной ($3, \bar{3}$), тетрагональной ($422, 4mm, \bar{4}2m, 4/mmm$), ромбической ($222, mm2, mmm$), моноклинной ($2, m, 2/m$) и триклинной ($1, \bar{1}$) систем. Установлена связь локальных коэффициентов Пуассона («радиального» и «окружного») с углом хиральности и продемонстрирована возможность управления размерами области их отрицательных значений с помощью изменения угла хиральности и геометрических параметров (величины отношения внешнего радиуса трубки к внутреннему). На основе проведенного анализа делается вывод о том, что количество ауксетиков среди хиральных трубок превышает их количество среди кристаллов.

Заключение содержит перечень наиболее значимых результатов, часть которых совпадает с положениями, выносимыми на защиту, из автореферата диссертации.

Степень обоснованности научных положений и выводов

Обоснованность научных положений и выводов обеспечивается теоремами существования и единственности решения рассмотренных в диссертации краевых задач линейной анизотропной теории упругости, а также надежностью экспериментальных методов определения использованных значений упругих постоянных из справочника Ландолта-Бернштейна.

Достоверность и новизна результатов диссертации

Полученные в работе решения удовлетворяют соответствующим граничным условиям. При решении краевых задач использовались известные методы анизотропной теории упругости, а при численных расчетах надежные экспериментальные данные для упругих постоянных, что обеспечивает **достоверность** результатов. Представленные в диссертации результаты обладают необходимой **новизной**. Здесь следует отменить как аналитические выражения для локальных коэффициентов Пуассона цилиндрически-анизотропных хиральных трубок, так и результаты поиска и исследования ауксетических свойств у низкосимметричных кристаллов.

Наиболее существенные результаты, полученные лично соискателем

1. Впервые проведен систематический поиск ауксетических свойств у кристаллов низкосимметричных систем: тригональной ($3, \bar{3}$), тетрагональной ($422, 4mm, \bar{4}2m, 4/mmm$), ромбической ($222, mm2, mmm$), моноклинной ($2, m, 2/m$) и триклинной ($1, \bar{1}$). Найдено и исследовано большое количество новых ауксетиков, в частности, получено условие глобального экстремума коэффициента Пуассона.
2. Проведен поиск ауксетических свойств у цилиндрически-анизотропных хиральных трубок, полученных сворачиванием кристаллических пленок следующих систем: тригональной ($3, \bar{3}$), тетрагональной ($422, 4mm, \bar{4}2m, 4/mmm$), ромбической ($222, mm2, mmm$), моноклинной ($2, m, 2/m$) и триклинной ($1, \bar{1}$). Доказано существование трубок с отрицательным коэффициентом Пуассона, а также установлено, что среди цилиндрически-анизотропных трубок ауксетичность встречается чаще, чем у кристаллов, используемых для их изготовления.

Замечания по диссертации.

1. При обсуждении эффекта закручивания цилиндрически-анизотропных

трубок при их растяжении осевой силой отсутствуют ссылки на статьи, посвященные данной проблеме, в частности:

Ting T.C.T., Pressuring, shearing, torsion and extension of a circular tube or bar of cylindrically anisotropic material – Proc. Roy. Soc. Lond. A, 1996, **452**, p. 2397-2421,

Ting T.C.T., New solutions to pressuring, shearing, torsion and extension of a cylindrically anisotropic elastic circular tube or bar – Proc. Roy. Soc. Lond. A, 1999, **455**, p. 3527-3542,

Chen T., Chung C.-T., Lin W.-L., A revisit of a cylindrically anisotropic tube subjected to pressuring, shearing, torsion, extension and a uniform temperature change – Int. J. Solids and Structures, 2000, **37**, p. 5143-5159.

2. Формула (1.3) дает неверное значение модуля Юнга при нулевом значении угла θ , что указывает на наличие в ней опечаток.

3. На стр. 100 понятие «сингонии» ошибочно отождествляется с понятием «системы решетки». Ромбоэдрической сингонии не существует, а кристаллы с ромбоэдрической решёткой Бравэ относятся к гексагональной сингонии и тригональной кристаллической системе.

4. В таблицах упругих податливостей кристаллов классов симметрии $(3, \bar{3})$ и $(32, 3m, \bar{3}m)$ тригональной системы (в работе она ошибочно названа ромбоэдрической) на стр. 102 компонента s_{55} указана как независимая, хотя наличие оси симметрии третьего порядка автоматически влечет за собой равенство $s_{55} = s_{44}$.

5. В работе имеется ряд опечаток: на стр. 10 («молекулярной динами» вместо «молекулярной динамики»), на стр. 26 (« $3 \rightarrow r$ » вместо « $3 \rightarrow z$ »), на стр. 36 («метод Сен-Вена» вместо «метод Сен-Венана»), на с. 102 (в матрице упругих податливостей гексагональной системы компонента s_{11} вместо s_{33} и компонента s_{12} вместо s_{13}).

Указанные замечания не снижают положительной оценки работы в целом.

Заключение

Все результаты автора опубликованы в научных журналах из списка ВАК и доложены на отечественных и международных конференциях. Автореферат и публикации автора отражают содержание диссертации. Автореферат также содержит отсутствующие в диссертации положения, выносимые на защиту. Работа в целом достаточно компактна, однако отличается большим объёмом представленного материала: при поиске ауксетиков были

исследованы сотни кристаллических структур.

Диссертация Волкова Михаила Андреевича представляет собой законченную научно-квалификационную работу в области механики ауксетиков, являющейся новым перспективным направлением в механике деформируемого твердого тела. По своим целям, задачам, содержанию и научной новизне работа полностью соответствует Требованиям п.9 Постановления Правительства РФ от 29 сентября 2013 г. № 842 «О порядке присуждения ученых степеней».

Считаю, что диссертационная работа М.А. Волкова удовлетворяет всем требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.02.04 - Механика деформируемого твердого тела.

Официальный оппонент
к.ф.- м.н., старший научный сотрудник
отдела теоретических исследований
Института кристаллографии им. А.В. Шубникова РАН,
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН

Белов А.Ю.

Подпись Белова А. Ю. удостоверяю
Учёный секретарь
ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН
к. ф.-м. н.



Просеков П.А.

119333, Москва, Ленинский проспект, д. 59
тел. +8(499) 135-62-40, E-mail: belov@crys.ras.ru