

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Беловой Оксаны Николаевны

«Приложения метода молекулярной динамики к задачам механики разрушения и атомистически-континуальное описание процессов разрушения», представленной на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.1.8. – «Механика деформируемого твердого тела»

В диссертации О.Н. Беловой рассматривается зарождение и распространение трещин на микро- и наноуровнях. При этом используются подходы и методы как классической механики разрушения, так и атомистического моделирования. Результаты, полученные различными методами, сравниваются между собой и находятся в хорошем соответствии.

Для исследования процессов распространения трещин на наноуровне О.Н. Белова применяет метод молекулярной динамики, в частности, открытый код LAMMPS. Полученные с помощью этой программы значения углов направлений распространения трещин для исследованных кристаллических материалов согласуются с известными результатами линейной механики разрушения для трещин смешанного типа (от нормального отрыва до поперечного сдвига). Кроме того, найденные методом молекулярной динамики напряженные состояния соответствуют асимптотическому разложению полей напряжений в окрестности вершин трещин, что позволило, используя разработанный О.Н. Беловой алгоритм, вычислить коэффициенты асимптотического разложения М. Уильямса более высокого порядка и сравнить их значения со значениями, полученными аналитически и методом конечных элементов.

Актуальность диссертационной работы обусловлена общей направленностью исследования процессов разрушения на микро- и наноуровнях.

Практическая значимость заключается в подтверждении возможности использования методов атомистического моделирования, в частности, молекулярной динамики, для исследования особенностей зарождения и распространения трещин в кристаллических материалах.

Достоверность полученных в диссертации результатов подтверждается использованием известных уравнений механики деформируемого твердого тела и удовлетворительным согласованием результатов моделирования и расчетов с экспериментальными данными, аналитическими решениями и результатами, полученными методом конечных элементов.

По автореферату диссертации имеются замечания.

1. В автореферате на рис. 2 отсутствует шкала величин компонент напряженного состояния, что затрудняет восприятие картины распределения полей напряжений.
2. При описании пятой главы, в которой приведены результаты конечно-элементных расчетов напряженно-деформированного состояния в трубе с трещиной, говорится о том, что «получены распределения второго

инварианта тензора напряжений». Однако для технических приложений, связанных с определением начала текучести, большее значение имеет распределение второго инварианта **девиатора** тензора напряжений.

Указанные замечания не умаляют значимости проделанной работы и полученных научных результатов.

На основании анализа содержания автореферата, основных результатов и выводов можно сделать заключение о том, что диссертация «Приложения метода молекулярной динамики к задачам механики разрушения и атомистически-континуальное описание процессов разрушения», представленная на соискание ученой степени кандидата технических наук, соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842 (ред. от 11.09.2021 г.), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор Белова Оксана Николаевна заслуживает присуждения ученой степени кандидата технических наук по специальности 1.1.8. – Механика деформируемого твердого тела.

*Я, Леган Михаил Антонович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Беловой Оксаны Николаевны, и их дальнейшую обработку.*

Ведущий научный сотрудник  
лаборатории статической прочности Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт гидродинамики им. М.А. Лаврентьева Сибирского отделения Российской академии наук (ИГиЛ СО РАН),  
доцент,  
д.т.н. по специальности 01.02.06 – динамика, прочность машин, приборов и аппаратуры

Леган Михаил Антонович

23

ИГиЛ СО РАН  
просп. Академика Лаврентьева, д. 1  
тел./факс 8 (383) 333-16-12, E-mail:

630090

Подпись д.т.н. Легана М.А. заверяла  
Ученый секретарь ИГиЛ СО РАН  
к.ф.-м.н.

А.К. Хе

26.09.2023 г.

