

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Орехова Никиты Дмитриевича «Многомасштабное моделирование плавления графита и графена», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности – 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертация Никиты Дмитриевича Орехова посвящена изучению фазовых превращений в графите и графене методами компьютерного моделирования.

Исследование плавления графита имеет глубокую историю. Начиная с 1930-х разные ученые пытались произвести экспериментальные измерения его температуры плавления. При этом результаты, полученные в разных группах, сильно различались: экспериментальные значения температуры плавления графита разнятся более чем на 1000 К. Очевидно, что такой разброс экспериментальных данных не может быть признан удовлетворительным.

Новый шаг в изучении фазовой диаграммы углерода в целом и плавления графита в частности был предпринят с развитием методов компьютерного моделирования. Для описания фазовой диаграммы углерода был разработан ряд различных потенциалов взаимодействия. На сегодняшний день наибольшее распространение получили так называемые bond order potentials (потенциалы Терсофа, Бреннера, AIREBO, семейство потенциалов LCBOP). Однако, методы компьютерного моделирования тоже не внесли ясности в изучение фазовой диаграммы углерода. Так, например, в работах с потенциалом Бреннера было выдвинуто предположение о существовании перехода жидкость-жидкость в углероде, которое было впоследствии опровергнуто самими авторами.

Таким образом, на сегодняшний день ситуация в изучении фазовой диаграммы углерода является весьма неоднозначной: несмотря на большое количество как экспериментальных, так и теоретических исследований, данные разных групп сильно отличаются друг от друга, что не позволяет составить единую картину фазовой диаграммы углерода. Поэтому детальное изучение фазовой диаграммы углерода является сложной и чрезвычайно актуальной задачей, которой и посвящена диссертация Н.Д. Орехова.

В диссертации произведено подробное изучение плавления графита и графена методами компьютерного моделирования. Применяя один из наиболее удачных потенциалов взаимодействия атомов углерода (AIREBO), автор провел моделирование кривой плавления графита в диапазоне давлений от 2 до 12 Гпа (глава 3). Существенным плюсом работы является то, что вычисления позволили оценить влияние скорости нагрева на наблюдаемую температуру плавления (глава 5), что позволило качественно объяснить большой разброс экспериментальных точек. Эти результаты являются чрезвычайно существенными для изучения плавления графита.

Кроме того, в четвертой главе производится изучение плавления графена и возможности перехода жидкость-жидкость в углероде. Показано, что механизм термического разрушения графена отличается от такового для графита, что приводит к существенному увеличению температуры плавления. Оценивается влияние скорости нагрева на температуру плавления графена.

Анализ структуры жидкости основывается на изучении концентрации атомов углерода с разной степенью гибридизации. Из этого анализа следует, что переход жидкость-жидкость в углероде отсутствует.

Таким образом, в диссертации получен ряд важных и интересных результатов, которые вносят существенный вклад в вопрос изучения фазовой диаграммы углерода. Тем не менее, в диссертации содержится ряд недостатков:

1. Диссертация написана крайне небрежно. Наиболее существенно это проявляется в описании методов исследования, в которых присутствуют очень большие неточности. Так, формула (9) на странице 41 написана неправильно. Ее описание в тексте также крайне расплывчато и не содержит необходимых для понимания работы данных. Аналогично, формулы (21) и (22) на странице 58 написаны неправильно. В результате метод проведения термодинамического интегрирования, примененный в диссертации, становится непонятным для читателя.
2. На рис. 27 на странице 67 приводится доля атомов, образующих гексагональные кольца. При этом в подписи к этому рисунку сказано, что это зависимость количества гексагональных колец, то есть подпись к рисунку не соответствует тексту, описывающему этот рисунок. При этом в диссертации не приводится никакого описания метода, применяемого для характеристики структуры графена. Например, что подразумевается под «числом частиц в гексагональных кольцах»? В идеальном кристалле графена каждая частица входит в три кольца – надо ли учитывать кратность 3 в этом случае? Понятно, что без подобного описания рис. 27 во многом просто теряет смысл, потому что разные определения могут приводить с несколько разным результатам.
3. На странице 83 говорится, что *«скорость нуклеации жидкой фазы в идеальном кристалле не проявляет зависимости от давления в диапазоне 2-12 ГПа»*. При этом автор ссылается на рис. 39 на странице 84. Однако, этот рисунок показывает зависимость времени нуклеации от температуры и давления, тогда как, согласно формуле 25 на странице 82, скорость нуклеации определяется временем нуклеации и объемом. Поскольку зависимость объема от давления и температуры в изучаемой области этих параметров не описана, вывод о постоянстве скорости нуклеации кажется необоснованным.
4. Автор получает интересный результат, что в пределах указанной точности вычислений (150 К) температура плавления графита не зависит от давления в интервале от 2 до 12 ГПа. Тот факт, что температура плавления не зависит от

давления, представляется удивительным и требует качественного объяснения. Однако, автор только декларирует этот факт, не пытаясь как-то его объяснить.

5. В литературном обзоре автор описывает вычисления кривой плавления графита, выполненные другими учеными с другими потенциалами. В частности, автор описывает кривую плавления графита, полученную с потенциалом LCBOP-1. Результаты для этого потенциала не согласуются с результатами, полученными автором, так как температура плавления зависит от давления. Автор диссертации также проводит вычисления для потенциала LCBOP-1, но только при одном давлении 4ГПа. Было бы интересно сравнить результаты для LCBOP-1 и AIREBO для нескольких давлений. Это имеет особую ценность, так как вычисления кривой плавления с LCBOP-1 проводились методом термодинамического интегрирования, а вычисления автора – методом двухфазного моделирования. Более того, это позволило получить дополнительное обоснование результатов, заявленных в диссертации, что особенно ценно ввиду отсутствия объяснения этих результатов, о чем говорилось в предыдущем замечании.

Несмотря на указанные недостатки, в работе получен ряд важных и интересных результатов. Диссертация Н.Д. Орехова удовлетворяет требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а автор заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент
доктор физико-математических наук,
ведущий научный сотрудник
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки
Института физики высоких давлений
им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук
Фомин Юрий Дмитриевич

Адрес: 108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14

Сайт: <http://www.hppi.troitsk.ru>

Тел. 8 (495)-851-05-82

E-mail: fomin314@mail.ru



Ю.Д. Фомин

Подпись Ю.Д. Фомина удостоверяю
Ученый секретарь ИФВД РАН, к.ф.-м.н.



Т.В. Валянская