

ОТЗЫВ

*на автореферат диссертации Н. Д. Орехова
«Многомасштабное моделирование плавления графита и графена»,
представленной на соискание ученой степени кандидата
физико-математических наук по специальности
01.04.07 – физика конденсированного состояния*

С исследованиями Н.Д. Орехова в области моделирования углерода мне впервые удалось познакомиться на десятом российском симпозиуме “Проблемы физики ультракоротких процессов в неравновесных средах” в 2012 году. В диссертационной работе автор Орехов Н.Д. представляет результаты исследования, посвященного изучению поведения графита и графена при высоких температурах с использованием метода молекулярной динамики. В работе сделана успешная попытка выявить и охарактеризовать возможную причину расхождения экспериментальных данных по температуре плавления графита, связанную с влиянием скорости нагрева образцов на время жизни перегретого метастабильного кристалла графита. Также автором рассматривается механизм термического распада монослоя графена.

Автором получены интересные научные результаты.

1. Расчет параметров кривой плавления графита при давлениях 2-12 ГПа, который впервые показал отсутствие зависимости параметров плавления от давления.
2. Рассчитана скорость движения межфазной границы расплав-кристалл в зависимости от температуры, которая оказалась в графите на несколько порядков ниже известных значений для кристаллов простых веществ.
3. Установлена возможность перегрева графита на сотни градусов выше температуры плавления на микросекундных временах и рассчитаны времена жизни подобной метастабильной системы.
4. Определена структура и плотность жидкой фазы углерода в диапазоне давлений 2-12 ГПа. Показано отсутствие фазовых переходов жидкость-жидкость в углероде.

Полученные данные представляются актуальными в контексте разнообразия вариантов технологического применения графита и композитных углеродных материалов на его основе, а также в связи с возросшим в последнее десятилетие интересом к углеродным наноструктурам.

Можно отметить некоторые недостатки.

1. Кристалл графита состоит из множества сайтов графена. Казалось бы, что температура плавления кристалла графита должна быть близкой к температуре

плавления графена. В работе *Галашев А.Е., Рахманова О.Р.* // УФН 2014. Т. 184. № 10. С. 1045 для температуры плавления графена указана величина 4900 К. В автореферате на стр. 13 «Для свободного листа графена получена температура распада $T_m^{graphen} = 4430$ К». Почему при МД моделировании плавления нанополоски графита, состоящего из графенов, они распадаются при более низкой температуре?

2. Неудачное словосочетание «рост величины имеет резкий характер» автореферат стр. 16.

Отмеченные недостатки не снижают научной и практической ценности работы.

Автореферат диссертации составлен с соблюдением установленных требований и дает вполне адекватное представление о работе. Результаты проведенных исследований нашли отражение в 4 опубликованных научных статьях автора. Диссертационная работа Н.Д. Орехова удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, а ее автор, несомненно, заслуживает присвоения ему искомого звания.

Заведующий кафедрой химической физики
Национального исследовательского ядерного
университета «МИФИ»
д.ф.-м.н., профессор
(e-mail: sagubin@mephi.ru)



Губин Сергей Александрович