

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по исследованиям и
разработкам МФТИ, д.т.н.



Гаричев Сергей
Николаевич

2017 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

федерального государственного автономного образовательного
учреждения высшего образования
«Московский физико-технический институт (государственный университет)»
(МФТИ)

Диссертация «Многомасштабное моделирование плавления графита и графена» выполнена на кафедре физики высокотемпературных процессов Московского физико-технического института (государственного университета) Министерства образования и науки Российской Федерации.

В период подготовки диссертации с 2014 г. по настоящее время **ОРЕХОВ Никита Дмитриевич** проходит обучение в очной аспирантуре на кафедре физики высокотемпературных процессов МФТИ.

В 2014 г. Орехов Н.Д. окончил Московский физико-технический институт (государственный университет) по специальности «прикладные математика и физика». Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2016 г. в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)».

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор СТЕГАЙЛОВ Владимир Владимирович. Основное место работы – федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Объединенный институт высоких температур» Российской академии наук, отдел компьютерной теплофизики, зав. отделом.

По итогам обсуждения диссертации «Многомасштабное моделирование плавления графита и графена» *принято следующее заключение.*

Тема диссертации является актуальной для развития представлений о строении фазовой диаграммы углерода, имеющей широкое приложение как в

технических дисциплинах, так и в фундаментальных исследованиях, и обусловлена значительной степенью противоречивости экспериментальных данных о кривой плавления графита. Помимо этого открытыми остаются вопросы, касающиеся фазовых переходов вида жидкость-жидкость, потенциально возможных в углероде. Также ранее ни в теоретических, ни в экспериментальных работах не исследовался вопрос о кинетике протекания фазовых переходов в углероде.

Цели и задачи диссертации:

1. Исследование кинетики процесса плавления в графите, определение температурных границ его устойчивости.
2. Расчет параметров кривой плавления графита при давлениях 2-12 ГПа.
3. Вычисление значения температуры плавления графена.
4. Определение структуры жидкой фазы углерода в диапазоне давлений 2-12 ГПа и анализ возможности существования фазовых переходов вида жидкость-жидкость в углероде.
5. Анализ возможных причин расхождения экспериментальных данных, касающихся вопроса положения кривой плавления графита.

Основные результаты диссертации:

1. Получена зависимость скорости распространения фронта плавления графита в диапазоне давлений 2-12 ГПа, показывающая, что кинетика образования жидкой фазы в графите на несколько порядков ниже известных значений для кристаллов простых веществ.
2. Построена кривая плавления графита в диапазоне давлений 2-12 ГПа.
3. Рассчитаны температурные пределы устойчивости графена.
4. Проведен анализ структуры жидкого углерода в диапазоне давлений 2-14 ГПа.
5. Построена мезоскопическая модель плавления графита, позволяющая интерпретировать разброс имеющихся экспериментальных данных по температуре плавления графита в контексте варьирования скорости нагрева.

Все **результаты диссертации получены лично соискателем** при научном руководстве д-ра физ.-мат. наук, профессора Стегайлова В.В.

Научная новизна работы заключается в том, что впервые на основе метода молекулярной динамики исследована кинетика образования жидкой фазы в перегретом кристалле графита. Рассчитана скорость движения межфазной границы расплав-кристалл в зависимости от температуры. Установлена возможность перегрева графита и графена на сотни градусов выше температуры плавления на микросекундных временах и рассчитаны времена жизни подобных метастабильных систем.

Практическая ценность результатов диссертации связана с разнообразием технологических применений графита и композитных углеродных материалов на его основе, а также возросшим в последнее десятилетие интересом к углеродным наноструктурам. Фазовая диаграмма углерода при высоких давлениях важна также для изучения строения ядер планет-гигантов. Фундаментальное значение имеет и проблема превращения графита в алмаз, требующая уточнения данных о положении кривой плавления графита и о поведении метастабильного вещества в окрестности линии фазового перехода.

Обоснованность и достоверность результатов и выводов.

Результаты молекулярно-динамических расчетов находятся в согласии с известными экспериментальными данными, а также расчетными данными других авторов. Положения и выводы, сформулированные в диссертации, получили квалифицированную апробацию на международных и российских научных конференциях и семинарах. Достоверность также подтверждается публикациями результатов исследования в рецензируемых научных изданиях, в том числе, рекомендованных ВАК

Материалы диссертации опубликованы автором достаточно полно в следующих работах:

1. Orekhov N.D., Stegailov V.V. Graphite melting: atomistic kinetics resolves long-standing controversy // Carbon.-2015.-v.87.-p.368-372.
2. Orekhov N.D., Stegailov V.V. Molecular-dynamics based insights into the problem of graphite melting // Journal of Physics: Conference Series.-2015.-v.653.-p. 012090.
3. Орехов Н.Д., Стегайлов В.В. Кинетика плавления графита // ДАН.-2015.-Т.461.-№2.-С.155-160.
4. Орехов Н.Д., Стегайлов, В.В., Молекулярно-динамическое моделирование плавления графита // ТВТ.-2014.-Т.52.-№2.-С.220-228.

Личный вклад соискателя в работах с соавторами заключается в следующем: все представленные в диссертации результаты получены лично автором. Задачи численных экспериментов по диссертационной работе сформулированы под руководством В.В. Стегайлова. Выводы и основные положения, выносимые на защиту, сформулированы автором.

Основные результаты работы докладывались на следующих научных конференциях и семинарах:

1. "Conference in computational physics 2017" (Париж, Франция, 2017)
2. "27th International Conference on Diamond and Carbon Materials – DCM 2016" (Монпелье, Франция, 2016)
3. "CARBON-2015" (Дрезден, Германия 2015)
4. "19th Biennial Conference on Shock Compression of Condensed Matter (SCCM-2015)" (Тампа, США 2015)

5. "Углерод: фундаментальные проблемы науки, материаловедение, технология" (Троицк, 2014)
6. "The XXVI IUPAP Conference on Computational Physics: CCP2013" (Москва 2013)
7. "Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук" (МФТИ 2012, 2013, 2014)
8. "Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество" и "Уравнения состояния вещества" (Эльбрус 2012, 2013, 2015, 2016)
9. "Проблемы физики ультракоротких процессов в сильнонеравновесных средах" (Новый Афон 2012)
10. "Nucleation Theory and Applications" (Дубна 2013)

Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, в частности, пунктам:

- п. 1 – Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы свойств металлов и их сплавов, неорганических и органических соединений, диэлектриков и в том числе материалов световодов как в твердом, так и в аморфном состоянии в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления.
- п. 2 – Теоретическое и экспериментальное исследование физических свойств неупорядоченных неорганических и органических систем, включая классические и квантовые жидкости, стекла различной природы и дисперсные системы.
- п. 5 – Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения.

Диссертация «Многомасштабное моделирование плавления графита и графена» **ОРЕХОВА Никиты Дмитриевича** рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности **01.04.07 – физика конденсированного состояния**.

Заключение принято на заседании кафедры физики высокотемпературных процессов МФТИ. Присутствовало на заседании 25 человек. Результаты голосования: «за» – 25 чел., «против» – нет, «воздержались» – нет. Протокол № 1 от 28 декабря 2015 года.



Левашов Павел Ремирович,
к.ф.-м.н., зам.зав. кафедрой физики
высокотемпературных процессов МФТИ