



Отзыв ведущей организации
на диссертацию Орехова Н.Д. на тему
«Многомасштабное моделирование плавления графита и графена»,
представленную на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Актуальность темы выполненной работы.

Актуальность темы обусловлена существенным интересом к развитию материаловедения технических продуктов на основе углерода. Ряд классических конструкционных материалов (конструкционные графиты, пиролитический графит, углеродные волокна и вискеры) пополнился такими материалами, как фуллерены, нанотрубки, графены и формы аэроуглерода. Углеродные материалы традиционно технически получают высокотемпературными процессами, которые в последних случаях превышают температуры сублимации.

В последнее время исследователей заинтересовал процесс плавления углеродных веществ, который тоже может стать качественно новым приёмом углеродного материаловедения. Однако, в настоящее время не устранены противоречия в фундаментальном вопросе – установлении значений температуры плавления в возможном интервале давления среды. Трудности установления физических параметров фазовых переходов в данном случае связаны с исключительно специфическими условиями эксперимента – наблюдаемые температуры процесса близки к температуре солнца.

Новизна исследований и полученных результатов, выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации.

Новизна исследований диссертанта заключается уже в том, что основным экспериментальным методом исследования кинетики плавления графита выбран компьютерный эксперимент на основе классической молекулярной динамики. Такой подход в настоящих условиях современной техники и технологии и предмета исследования, возможно, единственно, что может привести к получению в достаточной степени достоверного знания.

Базовые положения методологии в работе используют строгие термодинамические положения, что не только свидетельствует о квалификации диссертанта, но и убеждает в адекватности результатов всё-таки, в некотором смысле, в целом мысленном эксперименте.

Диссертантом 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 на сотни градусов выше температуры плавления на микросекундных временах и рассчитаны времена жизни подобной метастабильной системы. С помощью метода термодинамического интегрирования рассчитано положение кривой плавления графита в диапазоне давлений 2-12 ГПа. Последние два результата являются первым вкладом в потенциальную технологию.

Настоящая работа соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация Орехова Н.Д. является законченной научно - квалификационной работой, в которой содержится решение задачи, имеющей существенное значение для соответствующей отрасли знаний – физики конденсированных систем;

В работе содержатся научно обоснованные научные разработки, имеющие существенное значение для развития материаловедения углеродных веществ в экстремальных условиях:

- для проверки наличия фазового перехода жидкость-жидкость определен координационный состав жидкого углерода при температуре 4600 К. Отмечено, что в диапазоне 2-14 ГПа основная доля атомов (более 90%) находится в sp^2 -гибридизованном состоянии, и резкий переход к sp^3 -гибридизованной жидкости в данном диапазоне давлений не наблюдается;

- рассчитана зависимость скорости плавления графита в диапазоне давлений 2-12 ГПа: определены параметры гомогенной и гетерогенной нуклеации жидкого углерода. Показано, что скорость образования жидкой фазы в графите на несколько порядков ниже, известных значений для кристаллов простых веществ. Проведен анализ влияния выбора межатомного потенциала на кинетику плавления.

На протяжении всей работы прослеживается общая методология и методика исследования, которые основываются на классическом методе молекулярной динамики с учётом возросших вычислительных возможностей XX – XXI веков. Последнее позволило сделать качественный переход от расчёта парных ансамблей частиц к множественным, например, почти от 2000 до 7000 в настоящей работе. Такой множественный учёт осцилляторов даёт возможность

анализа мономерных, олигомерных и даже полимерных и надмолекулярных систем, в том числе и при проявлении этих структур в графите, как это отмечено автором в 3-й главе диссертации.

Обоснованность научных результатов, выводов и рекомендации следуют из *обильных* результатов расчётного эксперимента (например, рисунок 13 диссертации), которые непротиворечивы в пределах погрешности (например, рисунки 14 и 20 диссертации).

На протяжении основных глав диссертации и полностью соответствующего ей автореферата, прослеживается **внутреннее единство работы**, которое заключается в последовательном использовании в начале вычислительного эксперимента базовых термодинамических и кристаллографических основ строения углеродного вещества (см. например, главу 4, посвящённую анализу вопроса плавления графена), разработке или уточнении собственного инструмента исследования - математического аппарата, и затем в критическом анализе полученных результатов на фоне имеющихся литературных данных других исследователей.

Значимость для науки и производства полученных соискателем результатов заключается и в том, что служат расширению понимания физики углеродных технических материалов. В некоторых практических случаях изделия из углеродных конструкционных материалов, в том числе углерод-углеродных композитов, уже эксплуатируются в условиях приближающихся к найденным температурам фазовых превращений.

Выводы полностью отражают полученные результаты и подчеркивают их значимость.

Замечания.

1. В работе стоило обратить большее внимание на следующее: что становится с углеродным веществом, когда из состояния расплава либо идёт сначала его охлаждение, либо сначала снимается давление. Технические виды аллотропических форм углерода множественны, хотя и термодинамически несовершенны. На сегодня при конденсации паров углерода, полученных при атмосферном давлении, уже выделены фуллерены, астралены, нанотрубки и т.п., технические используемые в различных отраслях промышленности.
2. В расчетах в качестве модели для описания твердой фазы использован высокоориентированный пиролитический графит (ВОПГ). На странице 42 (рисунок 12) показана структурная модель графита. Однако, расстояние между графеновыми слоями на данном рисунке равно 0,34 нм. Данное межслоевое расстояние не характерно для высокоупорядоченного графита (0,3354 нм) и в большей степени приближено к параметру турбостратной структуры углерода (0,344 нм). Степень графитации для указанного на рисунке межслоевого расстояния составит 0,535. Вероятно, изменение

величины данного параметра может влиять на атом-атомное взаимодействие, что ранее было показано в работах Нагорного В.Г. Кроме того, по данным Андреаса К., Манкхольма А., Бреннана С. квазиоднокристалл состоит из анизотропных мозаичных блоков, текстурированных в направлении, параллельном графеновым плоскостям.

Однако указанные недостатки не являются принципиальными и не снижают общего положительного впечатления от диссертации и ее научной значимости, работа заслуживает высокой оценки.

Диссертация Орехова Никиты Дмитриевича на тему «Многочастичное моделирование плавления графита и графена» является завершенной научно-исследовательской работой. По актуальности тематики, объему представленного материала, его новизне, научной и практической значимости диссертация отвечает требованиям п. 7 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление Правительства РФ от 30 января 2002 г. № 74 в редакции постановления Правительства РФ от 20 июня 2011 г. № 475) и соответствует паспорту научной специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния, а диссертант Орехов Никита Дмитриевич заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Отзыв составил начальник Управления
углерод-углеродных композиционных
материалов АО «НИИГрафит»,
доктор технических наук, профессор



Колесников Сергей Анатольевич

111524, Москва, Электродная ул., д. 2
e-mail: SAKolesnikov@rosatom.ru;
8(495)278-00-08 доб. 25-41

Отзыв рассмотрен на заседании секции Научно-технического совета «Композиционные материалы и армирующие компоненты: получение, свойства» АО «Научно-исследовательский институт конструкционных материалов на основе графита «НИИГрафит» (г. Москва) 11 января 2018 года, протокол № 1.

Ученый секретарь, к.т.н.



Т.Д. Фирсова