

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.097.01,  
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ Федерального государственного бюджетного  
учреждения науки Института физики высоких давлений  
им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук ПО ДИССЕРТАЦИИ  
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 19 ноября 2018 года № 10

О присуждении ПОКАТАШКИНУ ПАВЛУ АЛЕКСАНДРОВИЧУ,  
гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-  
математических наук.

Диссертация «Молекулярно-динамическое исследование механических свойств боронасыщенных соединений со структурой типа  $\alpha$ -бора» по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния принята к защите 29 июня 2018 года (протокол № 4) Диссертационным советом Д 002.097.01, созданным на базе ФГБУН Института физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (Минобрнауки России), 108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14 (приказ Минобрнауки № 105/нк от 11.04.2012 г.).

Соискатель Покаташкин Павел Александрович, 1987 г. рождения, окончил в 2010 году магистратуру ФГБОУ ВО «Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» по направлению «прикладные математика и физика». В настоящее время работает в должности старшего научного сотрудника в Федеральном государственном унитарном предприятии «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова» (ФГУП «ВНИИА») Государственной корпорации по атомной энергии «РОСАТОМ».

Диссертация выполнена в ФГУП «ВНИИА».

Научный руководитель – кандидат физ.-мат. наук Янилкин Алексей Витальевич, ФГУП «ВНИИА», отдел 171, начальник отдела.

Официальные оппоненты:

доктор физ.-мат. наук, Дрёмов Владимир Владимирович, ФГУП «Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина», Отделение теоретической физики и прикладной математики, заместитель начальника отделения; кандидат физ.-мат. наук Квашнин Александр Геннадьевич, АНООВПО «Сколковский институт науки и технологий», Центр энергетики и технологий, старший научный сотрудник, дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация, ФГБОУ ВО «Национальный исследовательский технологический университет «МИСиС», в своем положительном отзыве, подписанном проректором по науке и инновациям доктором физ.-мат. наук, профессором Филоновым Михаилом Рудольфовичем, отмечает, что представленная работа полностью соответствует специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Соискатель имеет 11 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 4 работы, из них в рецензируемых изданиях опубликовано 4 работы, общим объемом 3,93 печатных листа.

Совместные работы соискателя выполнены при его непосредственном участии в постановке задач, проводимых расчетах, анализе результатов и формулировке выводов, подготовке текста публикаций.

Наиболее значительные работы по теме диссертации:

1. Pokatashkin P, Kuksin A, Yanilkin A. Angular dependent potential for boron and large-scale molecular dynamics simulations // Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering. 2015. Т. 23, №4. с. 45014.
2. Pokatashkin Pavel A, Korotaev Pavel Yu, Yanilkin Alexei V. Amorphization in  $\alpha$ -boron: A molecular dynamics study // Physical Review B. 2017. Т. 95, № 6. с. 064113.

На автореферат поступили положительные отзывы от доктора физ.-мат наук, профессора, заведующего лабораторией НИУ Высшая школа экономики Г.Э. Нормана; доктора физ.-мат. наук, чл.-корр. РАН, главного научного сотрудника ФНБУН Объединенного института высоких температур Российской академии наук Г.И. Канеля; заведующего кафедрой общей и прикладной физики ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет» А.Е. Майера; доктора физ.-мат. наук, профессора, главного научного сотрудника ФГБУН Института физики прочности и материаловедения СО РАН К.П. Зольникова; доктора физ.-мат. наук, профессора А.Г. Липницкого, заведующего лабораторией ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет». Отзыв Г.Э. Нормана не содержит замечаний, отзыв Г.И. Канеля содержит два непринципиальных замечания, которые, по его мнению, относятся скорее к стилю и качеству изложения, чем к качеству самой работы; в отзыве А.Е. Майера также указывается на стилистические погрешности и содержится вопрос о зависимости предела текучести от скорости деформации; в отзыве К.П. Зольникова содержится пожелание о включении в автореферат сведений о виде функций радиального распределения для аморфных структур; К.П. Липницкий в качестве замечания отметил, что в работе не проводится обсуждение прогноза энергии образования вакансии в случае чистого  $\alpha$ -бора с использованием построенных потенциалов. Авторы всех отзывов отмечают, что высказанные замечания не снижают общей положительной оценки работы.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается строгим соответствием направлений научных исследований, выполняемых оппонентами и реализуемых в ведущей организации, тематике представленной диссертационной работы, наличием публикаций в соответствующей области исследований.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- разработаны потенциалы межатомного взаимодействия, позволяющие моделировать  $\alpha$ -бор и карбид бора в широком диапазоне температур и давлений;

- предложен механизм возникновения деформационных дефектов, объясняющий наблюдаемое в экспериментах сосуществование тонкой аморфной полосы и дефекта упаковки;

- определена зависимость от давления предела текучести боронасыщенных материалов при скольжении вдоль аморфных зон.

Теоретическая значимость исследования обусловлена тем, что:

- построенные потенциалы межатомного взаимодействия позволяют исследовать боронасыщенные материалы ( $\alpha$ -бор и карбид бора) на атомистическом уровне;

- предложенный механизм деформации объясняет появление аморфных зон и дефектов упаковки при нагружении исследуемых материалов;

- рассчитанная зависимость предела текучести от давления в  $\alpha$ -боре и карбиде бора, определяемого механизмом скольжения вдоль аморфных зон, может быть использована в качестве характеристики деформируемого материала в моделях сплошной среды.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики определяется востребованностью боронасыщенных материалов в различных областях науки и техники (в замедляющих стержнях АЭС, в изделиях спецтехники, инструментах для обработки изделий из твердых материалов и т.д.) и, следовательно, необходимостью понимания механизмов, ответственных за отклик материалов на механические и термические воздействия. Полученные результаты дают основу для дальнейших исследований как рассмотренных материалов с целью улучшения их свойств, так и других материалов со сложными структурами и химическим составом.

Оценка достоверности результатов выявила, что построенные потенциалы межатомного взаимодействия для исследуемых материалов хорошо описывают свойства  $\alpha$ -бора и карбида бора в широком интервале температур и давлений, согласуются с расчетами методом теории функционала плотности и имеющимися экспериментальными данными.

Личный вклад соискателя состоит в самостоятельном получении, обработке и интерпретации результатов, представленных в диссертации, а также подготовке публикаций.

На заседании диссертационный совет принял решение присудить П.А. Покаташкину ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек, из них 13 докторов наук, участвовавших в заседании, из 19 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 14 , против – 0 , недействительных бюллетеней – 0 .

Председатель диссертационного  
совета, академик

  
Стишов Сергей Михайлович

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
к.ф.-м.н.

  
Валянская Татьяна Валентиновна

20 ноября 2018 г.

