Отзыв

на автореферат диссертационной работы Покаташкина П.А. «Молекулярно-динамическое исследование механических свойств боронасыщенных соединений со структурой типа α-бора», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Диссертационная работа Покаташкина П.А. посвящена актуальной тематике, связанной с построением потенциалов межатомного взаимодействия и их применением для изучения особенностей зарождения дефектов структуры в боронасыщенных материалах при ударных нагрузках, одноосном сжатии и сдвиге. Актуальность проведения таких исследований обусловлена не только получением новых фундаментальных знаний, но и высокой востребованностью данных материалов на практике.

Несомненным достижением диссертационной работы является разработка потенциалов межатомного взаимодействия для кристаллов α–бора и карбида бора, эффективно учитывающих многочастичные и нецентральные атомные взаимодействия. Построенные потенциалы с хорошей точностью описывают зависимость параметра решетки от давления, макроскопические упругие свойства, коэффициент теплового расширения и параметр Грюнайзена. Такие характеристики потенциалов позволили применить их для молекулярно-динамического моделирования поведения боронасыщенных соединений со структурой типа α–бора при различных механических нагружениях. На основе проведенных расчетов был вскрыт механизм формирования тонких аморфных полос и определена зависимость предела текучести от давления в исследуемых материалах при скольжении вдоль аморфных зон.

Известно, что аморфные структуры имеют специфический вид функций радиального распределения, которые характеризуются расщеплением второго пика. Если такие функции рассчитывались в диссертации, то их следовало бы включить в автореферат.

Основные результаты диссертации опубликованы в рейтинговых журналах, что свидетельствует о высоком уровне проведенных исследований.

Диссертация «Молекулярно-динамическое исследование механических свойств боронасыщенных соединений со структурой типа α-бора» удовлетворяет требованиям ВАК к кандидатским диссертациям, а ее автор, Покаташкин Павел Александрович, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Зольников Константин Петрович
доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник
Института физики прочности и материаловедения СО РАН
634055, г.Томск, пр.Академический 2/4
(3822) 286-972, kost@ispms.tsc.ru, www.ispms.ru

Подпись д.ф.-м.н., профессора
Зольникова К.П. заверяю:
ученый секретарь, ИФПМ СО РАН
к.ф.-м.н. Н.Ю.Матолыгина
Дата: 08.11.2018