

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 (ведомственная принадлежность – ФАНО)
ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 19 февраля 2018 года № 1

О присуждении ОРЕХОВУ НИКИТЕ ДМИТРИЕВИЧУ, гражданину
Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических
наук.

Диссертация «Многомасштабное моделирование плавления графита и графена» по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния принята к защите 4 декабря 2017 года, протокол № 3 Диссертационным советом Д 002.097.01 созданным на базе ФГБУН Института физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (ФАНО), 108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14 (приказ Минобрнауки № 105/нк от 11.04.2012 г.).

Соискатель Орехов Никита Дмитриевич, 1991 г. рождения, окончил в 2014 году магистратуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московского физико-технического института (государственного университета)» (МФТИ) по специальности «прикладные математика и физика». В настоящее время он проходит обучение в очной аспирантуре МФТИ на кафедре физики высокотемпературных процессов.

Диссертация выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Московском физико-техническом институте (государственном университете) на кафедре физики высокотемпературных процессов.

Научный руководитель - доктор физ.-мат. наук Стегайлов Владимир Владимирович, ФГБУН Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ФАНО), Отдел компьютерной теплофизики, заведующий отделом.

Официальные оппоненты:

доктор физ.-мат. наук Фомин Юрий Дмитриевич, ФГБУН Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (ФАНО), Лаборатория фазовых переходов в сильно коррелированных и неупорядоченных системах, ведущий научный сотрудник; кандидат физ.-мат. наук Рыльцев Роман Евгеньевич, ФГБУН Институт металлургии Уральского отделения Российской академии наук (ФАНО), Лаборатория аналитической химии, старший научный сотрудник, дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация АО «НИИГрафит», г. Москва, в своем положительном отзыве, подписанном Колесниковым Сергеем Анатольевичем, доктором технических наук, профессором, начальником Управления углерод-углеродных материалов, указала, что диссертация Орехова Никиты Дмитриевича на тему «Многомасштабное 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 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» 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.

Соискатель имеет 8 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 4 работы, из них в рецензируемых изданиях опубликовано 4 работы, общим объемом 3 печатных листа.

Совместные работы выполнены при непосредственном участии

соискателя в постановке задач, проведении аналитических и численных расчетов, анализе и трактовке полученных результатов, а также в подготовке статьи.

Наиболее значительные работы по теме диссертации:

1. Orekhov N. D., Stegailov V.V. "Graphite melting: Atomistic kinetics bridges theory and experiment" // Carbon V. 87 (2015): 358-364.
2. Орехов Н.Д., Стегайлов В.В. "Молекулярно-динамическое моделирование плавления графита" // ТВТ, 2014, том 52, № 2, с. 220–228.
3. Орехов Н.Д., Стегайлов В.В. "Кинетика плавления графита" // ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2015, том 461, № 2, с. 155–159.

На автореферат поступили положительные отзывы от кандидата физ.-мат. наук, начальника отдела компьютерного материаловедения ФГУП Всероссийского научно-исследовательского института автоматики им. Н.Л. Духова А.В. Янилкина; доктора физ.-мат. наук, профессора, заведующего кафедрой химической физики Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» С.А. Губина. Отзыв А.В. Янилкина не содержит замечаний. В отзыве С.А. Губина отмечены следующие недостатки, которые, по мнению С.А. Губина не снижают научной и практической ценности работы. Первое замечание связано с различием литературных данных для температуры плавления кристалла графита, состоящего из множества сайтов графена, и более низкой величины температуры распада нанополоски графита, состоящей из графенов, полученной в диссертации. Второе замечание носит чисто стилистический характер.

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:

- методами компьютерного моделирования исследована кинетика протекания фазовых и структурных переходов в графите, графене и жидком углероде;
- построена кривая плавления графита в диапазоне давлений 2-12 ГПа и рассчитаны температурные пределы устойчивости графена;
- получена температурная зависимость скорости распространения фронта плавления в графите в диапазоне давлений 2-12 ГПа;
- показано, что скорость образования жидкой фазы в графите на несколько порядков ниже известных значений для кристаллов простых веществ;
- предложена мезоскопическая модель плавления графита, позволяющая интерпретировать разброс имеющихся экспериментальных данных по температуре плавления графита с различиями в скорости нагрева.

Теоретическая значимость исследования обусловлена тем, что полученные в диссертации результаты позволили выявить и охарактеризовать возможную причину разброса экспериментальных значений температуры плавления графита. Результаты расчетов кинетики плавления графита продемонстрировали возможность значительного перегрева материала в экспериментах со сверхбыстрым нагревом графита. Проведенные исследования обеспечили получение надежно обоснованных данных о фазовой диаграмме углерода, в частности уточнили положение кривой плавления графита.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики обусловлено тем, что понимание механизмов термического разрушения графита и графена, а также выявление пределов их температурной устойчивости представляют существенный интерес при эксплуатации углерод-углеродных материалов в высокотемпературных режимах. Разработанные диссертантом вычислительные методы позволили уточнить фазовую диаграмму углерода, что может быть использовано при синтезе новых углеродных материалов.

Оценка достоверности результатов исследования подтвердила высокую точность и надежность представленных в диссертации расчетов. Такая оценка обеспечивается обоснованностью используемых теоретических подходов,

критическим анализом получаемых результатов, прямым сопоставлением результатов расчета с экспериментальной фазовой диаграммой углерода и с расчетными работами других авторов. Достоверность также подтверждается публикацией результатов исследования в рецензируемых научных изданиях, в том числе, рекомендованных ВАК.

Личный вклад соискателя состоит в выполнении всех расчетов, результаты которых представлены в диссертации, непосредственном участии в постановке задач и планировании работ, интерпретации результатов и формулировке выводов, а также подготовке публикаций.

На заседании 19 февраля 2018 г. диссертационный совет принял решение присудить Орехову Н.Д. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 16 человек, из них 15 докторов наук, участвовавших в заседании, из 19 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за – 16, против – 0, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель
диссертационного совета, академик



СТИШОВ Сергей Михайлович

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



Валинская Татьяна Валентиновна

21 февраля 2018 г.